

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

**As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.**

THIS PAGE BLANK (USPTO)

DOCKET NO.: 206523US0PCT

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE

IN RE APPLICATION OF: Kohki ISHIKAWA, et al.

SERIAL NO.: NEW U.S. PCT APPLICATION

FILED: HERewith

INTERNATIONAL APPLICATION NO.: PCT/JP00/05973

INTERNATIONAL FILING DATE: September 1, 2000

FOR: MUTANT NUCLEOSIDE-5'-PHOSPHATE PRODUCING ENZYMES

**REQUEST FOR PRIORITY UNDER 35 U.S.C. 119
AND THE INTERNATIONAL CONVENTION**Assistant Commissioner for Patents
Washington, D.C. 20231

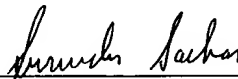
Sir:

In the matter of the above-identified application for patent, notice is hereby given that the applicant claims as priority:

COUNTRY
Japan**APPLICATION NO**
11/249545**DAY/MONTH/YEAR**
03 September 1999

Certified copies of the corresponding Convention application(s) were submitted to the International Bureau in PCT Application No. **PCT/JP00/05973**. Receipt of the certified copy(s) by the International Bureau in a timely manner under PCT Rule 17.1(a) has been acknowledged as evidenced by the attached PCT/IB/304.

Respectfully submitted,
OBLON, SPIVAK, McCLELLAND,
MAIER & NEUSTADT, P.C.



Norman F. Oblon
Attorney of Record
Registration No. 24,618
Surinder Sachar
Registration No. 34,423



22850

(703) 413-3000
Fax No. (703) 413-2220
(OSMMN 1/97)

THIS PAGE BLANK (USPTO)

108W

REC'D 15 NOV 2000
WIPO PCT

PCT/JP00/05973
09/807990
22.09.00

日本国特許庁

EKU

PATENT OFFICE
JAPANESE GOVERNMENT

JP00/5973

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出願年月日

Date of Application:

1999年 9月 3日

出願番号

Application Number:

平成11年特許願第249545号

出願人

Applicant (s):

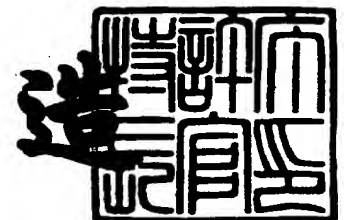
味の素株式会社

PRIORITY
DOCUMENT
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)

2000年10月27日

特許庁長官
Commissioner,
Patent Office

及川耕造



出証番号 出証特2000-3087544

【書類名】 特許願
 【整理番号】 1-990707-1
 【あて先】 特許庁長官 伊佐山 建志殿
 【国際特許分類】 C12N 9/00
 C12N 19/36
 【発明者】

【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 石川 弘紀
 【発明者】
 【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 鈴木 榮一郎
 【発明者】
 【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 榎藤 慶子
 【発明者】
 【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 榛葉 信久
 【発明者】
 【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 三原 康博
 【発明者】
 【住所又は居所】 神奈川県川崎市川崎区鈴木町 1 - 1 味の素株式会社中央研究所内
 【氏名】 川崎 寿

【発明者】

【住所又は居所】 富山県射水郡小杉町太閤山 9 - 3 - 1 - 3 2 1

【氏名】 浅野 泰久

【特許出願人】

【識別番号】 000000066

【氏名又は名称】 味の素株式会社

【代理人】

【識別番号】 100078503

【弁理士】

【氏名又は名称】 中本 宏

【選任した代理人】

【識別番号】 100087022

【弁理士】

【氏名又は名称】 井上 昭

【選任した代理人】

【識別番号】 100089428

【弁理士】

【氏名又は名称】 吉嶺 桂

【選任した代理人】

【識別番号】 100096415

【弁理士】

【氏名又は名称】 松田 大

【選任した代理人】

【識別番号】 100102369

【弁理士】

【氏名又は名称】 金谷 宥

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 055088

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9401160

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素

【特許請求の範囲】

【請求項1】 ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素において、Lys残基1つ、Arg残基2つ、His残基2つが存在し、これらのC α 間距離が図1に示す範囲内にあり、かつその付近にヌクレオシドが結合するスペースを有する、リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素のヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項2】 エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの結晶をX線結晶構造解析して得られる原子座標データに示されている構造座標を元に、イノシン、グアノシン等のヌクレオシド並びにそのリン酸化合物との結合様式を推定し、アミノ酸残基及び／又は補欠因子等の置換、追加、削除によりヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した請求項1記載の変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項3】 エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の72番目の残基が、他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項4】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼとのアミノ酸配列アラインメントをしたときに、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の72番目に対応する残基が他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項5】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの3次元構造とのアラインメントをトレディング法により行ったときに、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の72番目に対応する残基が、他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項6】 エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の以下の位置（エシェリヒア・ブラッタエ酸性ホスファターゼのSer 72

から10 Å以内にある残基) : 16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183の少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項7】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼとのアミノ酸配列アライメントをしたときに、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の以下の位置（エシェリヒア・ブラッタエ酸性ホスファターゼのSer72から10 Å以内にある残基） : 16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183に対応する少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項8】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの3次元構造とのアライメントをトレッディング法により行ったときに、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列の以下の位置（エシェリヒア・ブラッタエ酸性ホスファターゼのSer72から10 Å以内にある残基） : 16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183に対応する少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【請求項9】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素、あるいはそれとモリブデン酸との複合体の結晶をX線結晶構造解析して得られる立体構造から確定された、該酵素の活性部位、及び／又はそれから10 Å以内にあるアミノ酸残基を、置換、追加、削除をすることにより、ヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した変異型酵素を製造することを特徴とする変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素の製造方法。

【請求項10】 エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの構造座標を使用して、ホスファターゼ又はリン酸基転移酵素の阻害剤を製造する方法。

【請求項 11】 リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素、あるいはそれとモリブデン酸との複合体のいずれかの結晶。

【請求項 12】 六方晶系の空間群 $P6_322$ を有する、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの結晶。

【請求項 13】 斜方晶系の空間群 $P2_12_12_1$ を有する、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼ $G74D/I153T$ 変異型酵素の結晶。

【請求項 14】 三方晶系の空間群 $P3_121$ を有する、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼとモリブデン酸との複合体（反応中間体アナログ）の結晶。

【請求項 15】 請求項 1～8 のいずれか 1 項に記載の酵素をコードする遺伝子。

【請求項 16】 請求項 14 に記載の遺伝子を含む組換え DNA。

【請求項 17】 請求項 15 に記載の組換え DNA を保有する微生物。

【請求項 18】 請求項 1～8 のいずれか 1 項に記載の酵素、又はそれを含有する微生物、あるいは請求項 16 に記載の微生物を、ヌクレオシド並びにリン酸供与体に作用させてヌクレオシド-5'-リン酸を生成させ、これを採取することを特徴とするヌクレオシド-5'-リン酸の製造方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、ヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素、及びその製造方法に関する。また、本発明は、上記した酵素の製造に有用な酵素類に関する。更に本発明は、ヌクレオシド-5'-リン酸の製造方法に関し、またその製造方法に有用な、前記の変異型酵素をコードする遺伝子、該遺伝子を含む組換え DNA、該組換え DNA を保有する微生物に関する。ヌクレオシド-5'-リン酸は、調味料、医薬並びにそれらの原料として有用である。なお、本発明は、X線結晶構造解析技術により蛋白質の新規立体構造の解明に成功したことに基づくと共に、該立体構造は微生物に限らない発展性を有する。

【0002】

【従来の技術】

ヌクレオシドを生化学的にリン酸化してヌクレオシド-5'-リン酸を安価かつ効率的に製造する方法として、特定の微生物菌体を、酸性条件下でヌクレオシド並びにポリリン酸（塩）、フェニルリン酸（塩）及びカルバミルリン酸から成る群より選択されるリン酸供与体に作用させることにより、ヌクレオシド-2'-リン酸、ヌクレオシド-3'-リン酸異性体の副生を伴うことなくヌクレオシド-5'-リン酸を効率よく生成する方法が開発されている（特開平7-231793号）。

その後、エシェリヒア・ブラッタエ (*Escherichia blattae*) 及びモルガネラ・モルガニ (*Morganella morganii*) より酸性ホスファターゼをコードする遺伝子を取得し、遺伝子工学的に該遺伝子をエシェリヒア・コリで大量発現することによりヌクレオシド-5'-リン酸の生産性が更に向上することが確認された。

該酸性ホスファターゼの構造を図2に示す。すなわち、図2は、エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼ（以下、EB-APと略記する）のアミノ酸配列を、モルガネラ・モルガニ、サルモネラ・チフィウム (*Salmonella typhimurium*)、ザイモナス・モビリス (*Zymomonas mobilis*) 由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列とアラインメントした図である。星印は保存された残基を示す。2次構造の領域をアラインメントの上に棒で示した。四角の線で囲んだ部分は、酸性ホスファターゼファミリーの間で共通しているモチーフを示す。モチーフは、1) KXXXXXXRP, 2) PSGH, 3) SRXXXXHXXDの3つのドメインから成り立っている。ここで、Xは任意のアミノ酸である。

該酸性ホスファターゼ（図2）は、リン酸基転移活性を有するものの、野生型においては、ヌクレオシド-5'-リン酸をヌクレオシドに分解するホスファターゼ活性が優勢であり、蓄積されたヌクレオシド-5'-リン酸が分解されてしまう欠点があった。そこで、ランダムに多数の変異型酵素を発生させ、その中からホスファターゼ活性に比してリン酸基転移活性が相対的に向上した変異型酸性ホスファターゼが見出され、該変異型酸性ホスファターゼ遺伝子を大量発現させることによりヌクレオシド-5'-リン酸の生産性が飛躍的に向上することが示

された（特開平 8-535568 号）。

該変異型ホスファターゼは、ヌクレオシドに対する親和性が向上しており、それによりリン酸基転移活性が改善されたと考えられる。

上記のエシェリヒア・ブラッタエ由来変異型酸性ホスファターゼ（=G74D/I153T 変異型酵素）は、モルガネラ・モルガニ由来酸性ホスファターゼ（MM-AP）の対応する G72D/I151T 変異型酵素よりリン酸基転移活性が弱い、8つのアミノ酸残基を一次構造上対応する MM-AP のアミノ酸に置換した 10 残基置換 L63Q/A65Q/E66A/N69D/S71A/S72A/G74D/T135K/E136D/I153T 変異型酵素（以降、単に 10 残基置換変異型 EB-AP と記述）は、G72D/I151T 変異型 MM-AP とほぼ同等のリン酸基転移活性を得ることが示された（特開平 9-161674 号）。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】

上述の生産性が向上したエシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼ（EB-AP）の G74D/I153T 変異型酵素遺伝子、更には 10 残基置換変異型酵素遺伝子をエシェリヒア・コリで大量発現することによりヌクレオシド-5'-リン酸を生産する方法が確立された（特開平 8-535568 号、特開平 9-161674 号）が、更に生産性の向上した変異型 EB-AP が望まれる。本発明は、EB-AP の 3 次元構造に基づいて、変異型 EB-AP を設計することにより、ヌクレオシド-5'-リン酸生産性の更なる向上を図ることを課題とする。

【0004】

【課題を解決するための手段】

本発明を概説すれば、下記に列挙するとおりである。

(1) ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素において、Lys 残基 1 つ、Arg 残基 2 つ、His 残基 2 つが存在し、これらの C α 間距離が図 1 に示す範囲内にあり、かつその付近にヌクレオシドが結合するスペースを有する、リン酸基転移活性及び/又はホスファターゼ活性を有する酵素のヌクレオシド-5'-リン酸生産

能が向上した変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(2) EB-APの結晶をX線結晶構造解析して得られる原子座標データに示されている構造座標を元にして、イノシン、グアノシン等のヌクレオシドとの結合様式を推定し、アミノ酸残基及び／又は補欠因子等の置換、追加、削除をすることによりヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した(1)項記載の変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(3) EB-APのアミノ酸配列の72番目の残基が、他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(4) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、EB-APとのアミノ酸配列アラインメントをしたときに、EB-APのアミノ酸配列の72番目に対応する残基が他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(5) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、EB-APの3次元構造とのアラインメントをトレッディング(Threading)法(与えられた配列に、既知の立体構造のフィールドを取らせて、その配列の立体構造に対する適合度を評価する方法)により行ったときに、EB-APのアミノ酸配列の72番目に対応する残基が、他のアミノ酸で置換された変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(6) EB-APのアミノ酸配列の以下の位置(EB-APのSer 72から10 Å以内にある残基): 16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183の少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(7) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、EB-APとのアミノ酸配列アラインメントをしたときに、EB-APのアミノ酸配列の以下の位置(EB-APのSer 72から10 Å以内にある残基): 16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183に対応する少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

(8) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素で、EB-APの3次元構造とのアラインメントをトレディング法により行ったときに、EB-APのアミノ酸配列の以下の位置（EB-APのSer 72から10Å以内にある残基）：16、67-76、78-79、96、99-100、102-104、106-108、149-154、157、179、183に対応する少なくとも一つの位置に変化が生じている変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素。

【0005】

(9) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素、あるいはそれとモリブデン酸との複合体の結晶をX線結晶構造解析して得られる立体構造から確定された、該酵素の活性部位に位置するアミノ酸残基（Lys 1つ、Arg 2つ、His 2つにより構成される）、及び／又はそれから10Å以内にあるアミノ酸残基を、置換、追加、削除をすることにより、ヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した変異型酵素を製造することを特徴とする変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素の製造方法。

(10) エシェリヒア・ブラッタエ由来酸性ホスファターゼの構造座標を使用して、ホスファターゼ又はリン酸基転移酵素の阻害剤を製造する方法。

【0006】

(11) リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素、あるいはそれとモリブデン酸との複合体のいずれかの結晶。

(12) 六方晶系の空間群 $P6_322$ を有する、EB-APの結晶。

(13) 斜方晶系の空間群 $P2_12_12_1$ を有する、EB-AP G74D/I153T変異型酵素の結晶。

(14) 三方晶系の空間群 $P3_121$ を有する、EB-APとモリブデン酸との複合体（反応中間体アナログ）の結晶。

【0007】

(15) (1)～(8)項のいずれか1項に記載の酵素をコードする遺伝子

(16) (15)項に記載の遺伝子を含む組換えDNA。

(17) (16) 項に記載の組換えDNAを保有する微生物。

【0008】

(18) (1) ~ (8) 項のいずれか1項に記載の酵素、又はそれを含有する微生物、あるいは(17)項に記載の微生物を、ヌクレオシド並びにリン酸供与体に作用させてヌクレオシド-5'-リン酸を生成させ、これを採取することを特徴とするヌクレオシド-5'-リン酸の製造方法。

【0009】

本発明は、EB-APの3次元構造を基に、ヌクレオシドとの結合様式モデルを構築し、それに基づき設計した変異型EB-APを利用したヌクレオシド-5'-リン酸の生産方法を提供する。

【0010】

【発明の実施の形態】

以下、本発明を具体的に説明する。

(1) X線結晶構造解析により蛋白質の3次元構造を決定するには、蛋白質を結晶化する必要がある(実施例1-3に詳細を示した)。蛋白質を結晶化するためには、pH、バッファの種類、バッファの濃度、沈殿剤の種類、沈殿剤の濃度、金属等の添加剤の濃度、蛋白質の濃度、蛋白質の純度、等、数多くのパラメーターを試行錯誤により決定しなくてはならない。したがって、結晶を得るまでに数ヶ月~数年の時間がかかるのが通常であり、多大な労力に反して結晶が得られないケースも多々ある。結晶化は、3次元構造決定のためには欠かせないが、それ以外にも、蛋白質の高純度の精製法、高密度でプロテアーゼ抵抗性の強い安定な保存法、更には酵素の固定化利用に先立つプロセスとして産業上の有用性もある。

(2) 作製した結晶にX線を照射して回折データを収集する。蛋白質結晶はX線照射によりダメージを受け回折能が劣化するケースが多々ある。その場合、結晶を急激に-173℃程度に冷却し、その状態で回折データを収集する低温測定が最近普及しつつある。なお、冷却に際しては、結晶が崩壊せず系全体がガラス状になるよう溶媒組成を工夫する必要がある。

(3) 結晶構造解析を行うには、回折データに加えて、位相情報が必要にな

る。

EB-A Pは、類縁の蛋白質の立体構造が未知であるため、重原子同型置換法により位相問題が解決されなくてはならない。重原子同型置換法は、水銀や白金等原子番号が大きな金属原子を結晶に導入し、金属原子の大きなX線散乱能のX線回折データへの寄与を利用して位相情報を得る方法である。野生型EB-A Pの立体構造が決定されれば、変異型酵素及び反応中間体アナログ等類縁体の結晶構造は、それを用いた分子置換法により決定できる。分子置換法は、結晶構造を決定したい蛋白質に類縁の蛋白質の立体構造が既知の場合、その立体構造を利用して構造決定を行う手法である。例えば、ある蛋白質の野生型の立体構造が分かっているならば、その変異型蛋白質や化学修飾された蛋白質の結晶構造決定には、分子置換法が適用できる。

G74D/I153T変異型EB-A Pについては、2ヶ所のアミノ酸置換によるヌクレオシド親和性向上の分子機構解明のために結晶構造を決定する。

反応中間体アナログについては、ヌクレオシドとの結合様式モデルを構築するために結晶構造を決定する。ヌクレオシドは、供与されるリン酸基が共有結合した状態のEB-A P、すなわち反応中間体に結合した後、ヌクレオシト-5'-リン酸に変換される。EB-A Pの反応中間体は不安定なので、その構造を捉えることができないが、リン酸の代りにモリブデン酸が共有結合した反応中間体アナログであれば加水分解されることがないので構造決定可能と考えた。実施例4、6、7に詳細を示した。

【0011】

(4) コンピュータグラフィックス(CG)上で、反応中間体アナログの3次元構造におけるモリブデン酸結合位置を基に、その付近の窪みにヌクレオシドをフィットさせ、結合様式モデルを構築する(図3)。モデルの構築には、例えばMSI社(アメリカ)のQUANTA, INSIGHT IIの様なプログラムを利用する。

なお、図3は、上記の結合様式モデルの結晶構造を示す写真である。

実施例5、8に詳細を示した。

(5) 結合モデルを良く観察し、ヌクレオシドとの親和性を増大させる変異を設計する。親和性を向上させるには、疎水相互作用・静電相互作用・水素結合

・ π - π 相互作用（芳香環の環電流が発生する磁場同士の相互作用）・CH/ π 相互作用（芳香環の環電流とメチル基の電子が発生する磁場の相互作用）を増強する手段が考えられる。変異は、G74D/I153T変異型EB-APに対して導入することにする。この場合、作製される変異型酵素は、3残基置換変異型酵素となる。

実施例9、13に詳細を示した。

(6) PCR法により、変異型EB-APをコードする遺伝子を含むプラスミドを作製する。プラスミドをエシェリヒア・コリ (*Escherichia coli*) JM109に導入し、変異型EB-APを生産させる。変異型EB-APのイノシンに対する親和性の指標になる K_m 値、及びイノシンを5'-イノシン酸に変換するリン酸基転移活性を測定し、変異型EB-APの性能を評価する。ヌクレオシド-5'-リン酸の生産量は、多分に K_m 値に依存すると考えられる。ピロリン酸がEB-APと反応し、リン酸イオンが離脱し、リン酸基がEB-APと共有結合した形の反応中間体が形成された後、水分子がこれを攻撃すれば、リン酸基が外れてしまう（ホスファターゼ反応）。ピロリン酸は、ヌクレオシド-5'-リン酸を生成せずに無駄に消費されたことになる。一方、ヌクレオシドが反応中間体を攻撃すれば、リン酸基はヌクレオシドとホスホモノエステル結合を形成し、生成したヌクレオシド-5'-リン酸がEB-APから離脱する（リン酸基転移反応）。ピロリン酸はヌクレオシド-5'-リン酸生成に活用されたことになる。つまり、反応中間体を水とヌクレオシドが取り合い水が勝てばホスファターゼ活性が、ヌクレオシドが勝てばリン酸基転移活性が、発揮されることになる。ヌクレオシドのEB-APに対する親和性が上昇すれば、すなわち、 K_m 値が低下すれば、リン酸基転移反応が行われる可能性が高くなる。また、リン酸結合部位付近の疎水性を高め、水が近づきにくくなれば、ホスファターゼ活性が弱まり、リン酸基転移活性が相対的に強まることになる。実施例10、11、13に詳細を示した。

(7) K_m 値が低下し、かつリン酸基転移活性が上昇した変異型EB-AP遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を用いて、イノシンから5'-イノシン酸を生産する実験を行う。30℃で45時間反応を行い

5'-イノシン酸生産量の経時変化をモニターする。実施例 12、14 に詳細を示した。

【0012】

EB-AP 以外でも、EB-AP と同様の活性部位及びヌクレオシドが結合するスペースを持つ酵素であれば、ヌクレオシド-5'-リン酸の生産に利用できるポテンシャルがある。活性部位は、活性に必須なアミノ酸残基を有し、かつ、それらが適切な空間的位置関係で配置されていなくてはならない。EB-AP においては、Lys115, Arg122, His150, Arg183, His189 が活性に必須であり、これら 5 残基の C α 間距離によって空間的位置関係を規定することが可能である。本発明においては、野生型、G74D/I153T 変異型、反応中間体アナログの 3 つの EB-AP 結晶構造を決定したので、それぞれの構造における活性残基の C α 原子間距離を測り、表 1 を作成した。表 1 の各々の距離分布が約 1 Å の幅を持つことから、最短距離より 1 Å 短い距離（表 1、下限）以上、最長距離より 1 Å 長い距離（表 1、上限）以下であれば、求められる活性部位を形成できるものと考えた。図 1 に、5 つの残基の位置関係を上限、下限の C α 間距離と共に示した。

ヌクレオシドをリン酸化して、ヌクレオシド-5'-リン酸に変換するには、上記の 5 残基から成る活性部位だけでは不十分で、ヌクレオシドが適切な位置に結合できなくてはならない。EB-AP の場合は、リン酸基の結合部位付近に、ヌクレオシドが結合するのに適した溝状のスペースが分子表面に存在する〔（図 3）：添付した原子座標を示す図 10～図 45 を用いて、コンピュータグラフィックス（CG）上で表示できる。〕この溝は、Leu16、Ser72、Glu104、His189 の 4 残基によって囲まれるスペースとして規定される。活性部位を有していても、ヌクレオシドが結合する適切なスペースがない酵素は、ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素としては不適である。

【0013】

【表 1】

| | | 野生型 | G74D/I153T 変異型 | 反応中間体 アナログ | 下限 | 上限 |
|--------|--------|-------|-------------------|---------------|-------|-------|
| Lys115 | Arg122 | 11.6Å | 11.6Å | 11.4Å | 10.4Å | 12.6Å |
| | His150 | 12.4Å | 12.3Å | 12.8Å | 11.3Å | 13.8Å |
| | Arg183 | 16.4Å | 16.3Å | 15.5Å | 14.5Å | 17.4Å |
| | His189 | 12.6Å | 12.1Å | 11.7Å | 10.7Å | 13.6Å |
| Arg122 | His150 | 13.2Å | 13.6Å | 14.2Å | 12.2Å | 15.2Å |
| | Arg183 | 10.4Å | 10.5Å | 10.8Å | 9.4Å | 11.8Å |
| | His189 | 5.6Å | 5.5Å | 5.7Å | 4.5Å | 6.7Å |
| His150 | Arg183 | 8.4Å | 8.8Å | 7.7Å | 6.7Å | 9.8Å |
| | His189 | 9.8Å | 10.0Å | 10.0Å | 8.8Å | 11.0Å |
| Arg183 | His189 | 5.5Å | 5.8Å | 5.7Å | 4.5Å | 6.8Å |

【0014】

また、本発明は、Ser 72の他のアミノ酸への置換、好ましくはPhe, Tyr, Trp等の芳香族アミノ酸、Val, Ile, Leu等の疎水性アミノ酸、Glu, Asp等の酸性アミノ酸のいずれか一つのアミノ酸への置換、を施した変異型EB-AP、更に、それに加えて、ヌクレオシド-5'-リン酸生産能を向上させることが既に公表されているG74DとI153Tの2変異を施した3残基置換変異型EB-APを提供する。ここで置換とは、人為的にアミノ酸残基を置換した場合のみならず、自然界において置換が生じたEB-APと同じ酵素ファミリーに属する他の酸性ホスファターゼを選抜することも包含する。

【0015】

また、EB-APと同じ酵素ファミリーに属する他の酸性ホスファターゼにおいても、相同のアミノ酸変異を施せば、ヌクレオチド-5'-リン酸の製造に利用することが可能である。ただし、EB-APのアミノ酸残基が、他の酸性ホスファターゼにおいて同じ番号のアミノ酸残基に対応するとは限らない。例えば、EB-APのSer72は、MM-APにおいてはAla70に対応する。2つの異なった蛋白質のアミノ酸残基の対応付けは、両者のアミノ酸配列の相同性が20%

程度以上であればアミノ酸配列同士のアラインメント (Sequence Alignment)、20%程度以下であれば3次元構造とアミノ酸配列のアラインメント (Threading) により判明する。

前者はBLAST等、後者はINSIGHT II等のプログラムにより実行が可能である。

BLASTを用いた、EB-A Pとエンテロバクター・アエロゲネス (Enterobacter aerogenes) 由来酸性ホフターゼ (EA-A P) のアミノ酸配列アラインメントを実施例 1 4 に示した。

BLASTは、FTPを使って、ncbi.nlm.nih.govより/blast/executableに存在するファイルのうち、使用するコンピューターに則したファイルを手に入ればよい。

操作法については、http://genome.nhgri.nih.gov/blastall/blastinstallに詳細が記述されている。

【0016】

以上詳細に説明したように、ヌクレオシド-5' -リン酸生産能向上は、ヌクレオシドとの親和性向上により達成されるケースが多いが、それ以外にも、ホフターゼ活性の抑制、反応速度の向上、至適pHのシフト、等によっても達成されうる。

【0017】

【実施例】

以下、本発明を実施例により更に具体的に説明するが、本発明はこれらの実施例に限定されない。

【0018】

実施例 1 野生型EB-A Pの結晶化

ハンギングドロップ法での蒸気拡散を利用して結晶化を行った。野生型EB-A P (濃度10mg/ml) を含むリン酸ナトリウムの20mM緩衝液(pH8.0)と、45(w/v%)のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の100mM緩衝液を同量ずつ(各々7~10μl)、シリコナイゼーションしたカバーガラス上に滴下混合し、45(w/v%)のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の100mM緩衝液500μlを満たしたウエル(well)

の上に混合液滴が釣り下がるようにかぶせ、20℃にて静置した。2、3日後に結晶が析出し、1週間から2週間後には測定可能な大きさ（0.3×0.3×1.2 mm程度）の六角柱状の結晶に成長した。X線データ測定の際には、50（w/v%）のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の100 mM緩衝液（pH 8.0）に結晶を移した。

この結晶は、取扱い上、次の点に留意する必要があった。1）液滴（ドロップレット）から、結晶を取り出す際に容器や用具に接触することで結晶が非常に崩れやすいため、シッティングドロップ法の結晶化形態は用いることが出来ず（結晶は成長するが）、ここで述べたハンギングドロップ法を用いた。2）常温測定では、測定中に結晶が劣化し、徐々に分解能が下がるため、低温条件下での測定が必要であった。結晶をステージにマウントするまでの時間を極力短くし、空気にさらさないように工夫した。

（株）リガクのX線回折装置R-Axis IIcを用いて、X線回折データを収集し、結晶学的パラメーターを決定した。空間群は $P6_322$ 、格子定数は、 $a = b = 124.4 \text{ \AA}$ 、 $c = 97.7 \text{ \AA}$ となった。非対称単位に分子量25000のサブユニットを一つ含むと仮定すると、結晶の水分含有率は72%となる。

【0019】

実施例2 G74D/I153T変異型EB-APの結晶化

ハンギングドロップ法での蒸気拡散を利用して結晶化を行った。G74D/I153T変異型酵素（濃度20 mg/ml）を含むトリス塩酸の20 mM緩衝液（pH 8.0）と、38（w/v%）のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の20 mM緩衝液を同量ずつ（各々5 μ l）、シリコナイゼーションしたカバーガラス上に滴下混合し、38（w/v%）のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の20 mM緩衝液500 μ lを満たしたウェルの上に混合液滴が釣り下がるようにかぶせ、20℃にて静置した。2、3日後に結晶が析出し、1週間後には測定可能な大きさ（0.7×0.4×0.2 mm程度）の板状結晶に成長した。X線データ測定の際には、50（w/v%）のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の100 mM緩衝液（pH 8.0）に結晶を移した。

(株)リガクのX線回折装置R-Axis IIcを用いて、X線回折データを収集し、結晶学的パラメーターを決定した。空間群は $P2_12_12_1$ 、格子定数は $a = 138.0 \text{ \AA}$ 、 $b = 168.3 \text{ \AA}$ 、 $c = 58.2 \text{ \AA}$ となった。非対称単位に分子量150000の6量体分子を一つ含むと仮定すると、結晶の水分含有率は64%となる。

【0020】

実施例3 野生型EB-APとモリブデン酸との複合体（反応中間体アナログ）の結晶化

シッティングドロップ法での蒸気拡散を利用した共結晶化法を用いて結晶化を行った。野生型EB-AP（濃度 10 mg/ml ）を含むリン酸ナトリウムの 20 mM 緩衝液（ $\text{pH} 8.0$ ）と、 40 (w/v\%) のポリエチレングリコール400、及び 1 mM のモリブデン酸ナトリウムを含むトリス塩酸の 100 mM 緩衝液を同量ずつ（各々 $15 \mu\text{l}$ ）を、 40 (w/v\%) のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の 100 mM 緩衝液（ $\text{pH} 8.0$ ） $500 \mu\text{l}$ を満たしたウェルに設置したブリッジの窪みに滴下混合し、 20°C にて静置した。2～3日後に結晶が析出し、1週間から2週間後には測定可能な大きさ（ $0.3 \times 0.3 \times 0.3 \text{ mm}$ 程度）の菱餅状の結晶に成長した。X線データ測定の際には、 50 (w/v\%) のポリエチレングリコール400を含むトリス塩酸の 100 mM 緩衝液（ $\text{pH} 8.0$ ）に結晶を移した。

(株)リガクのX線回折装置R-Axis IIcを用いて、X線回折データを収集し、結晶学的パラメーターを決定した。空間群は $P3_121$ 、格子定数は $a = b = 86.6 \text{ \AA}$ 、 $c = 205.3 \text{ \AA}$ となった。非対称単位に分子量25000のサブユニットを3つ含むと仮定すると、結晶の水分含有率は58%となる。

【0021】

実施例4 野生型EB-APの結晶構造解析

最高 1.9 \AA 分解能データまでのX線回折データを測定した。結晶は、常温においては、X線の照射によるダメージが激しかったので、 -173°C に急速冷却して測定を行うことで、重金属塩類の溶液中に結晶を浸すことにより、重原子誘導体のスクリーニングを行った。重原子誘導体結晶の回折データはリガクR-Axis

IIcを用いて得た。ネイティブデータとの差フーリエ図より、 K_2PtCl_4 が良好な重原子同型結晶を与えることを見出した。プログラムRSPSを用いることにより、 K_2PtCl_4 の唯一のプラチナ結合部位の座標を求めた。この座標をプログラムMLPHAREにより精密化し、それから計算される位相を求めた。この位相を用い、2つ目の重原子誘導体 $KHgI_4-KI$ の5カ所の水銀結合部位を求めた。 K_2PtCl_4 、 $KHgI_4-KI$ 両方の重原子パラメーターをMLPHAREを用いて同時に精密化した後、プログラムDMを用いて、溶媒平滑化とヒストグラムマッチングを行い、位相を改良した。ちなみに、 K_2PtCl_4 については異常分散データも使用した。この良好な位相を用いて計算した電子密度マップは非常に鮮明で、ほとんどのアミノ酸残基をきれいにフィットすることができた。

最初のモデルは、2.8 Å分解能で作成した電子密度マップ上でプログラムQUANTAを用いて構築し、プログラムX-PLORを用いて構造精密化を行った。N末の6残基、135-136番目の残基、C末の1残基は電子密度が観測されず、構造を一義的に決定できなかった。1.9 Å分解能で精密化された最終モデル(図4～図6)は、全231残基中222残基、236個の水分子、1分子の硫酸イオンを含む。硫酸イオンは、精製過程で用いた硫酸アンモニウムに由来しており、活性中心のリン酸結合部位に一致するものと考えられる。8～1.9 Å分解能の反射を用いた結晶学的信頼度因子(R因子)は21.5%となった。平均の温度因子は、蛋白質原子について 2.6 \AA^2 、水分子について 4.5 \AA^2 となった。プログラムPROCHECKを用いてラマチャンドランプロットを作成したところ、グリシン以外の残基の93%が最も好ましい領域に、7%が次に好ましい領域に位置することが示された。非対称単位にはサブユニット1個が含まれ、結晶学的対称性によって6量体が形成される。原子座標は図10～図45に示した。

【0022】

なお、図4は、EB-APの6量体分子の結晶構造を示すCG写真である。 α 炭素原子の流れをリボンモデルで表示した。また、活性中心をマークする硫酸イオンをボールモデルで表示した。

図5は、EB-APのサブユニットの結晶構造を示すCG写真である。 α 炭素原子の流れをリボンモデルで表示した。また、活性中心をマークする硫酸イオン

をボールモデルで表示した。

図6は、EB-APの活性部位構造を示す図である。中央に硫酸イオンを示した。また、水素結合を点線で示した。

図10は、EB-APの構造の結晶学データ(1)を示す図である。

図11は、EB-APの構造の結晶学データ(2)を示す図である。

図12は、EB-APの構造の結晶学データ(3)を示す図である。

図13は、EB-APの構造の結晶学データ(4)を示す図である。

図14は、EB-APの構造の結晶学データ(5)を示す図である。

図15は、EB-APの構造の結晶学データ(6)を示す図である。

図16は、EB-APの構造の結晶学データ(7)を示す図である。

図17は、EB-APの構造の結晶学データ(8)を示す図である。

図18は、EB-APの構造の結晶学データ(9)を示す図である。

図19は、EB-APの構造の結晶学データ(10)を示す図である。

図20は、EB-APの構造の結晶学データ(11)を示す図である。

図21は、EB-APの構造の結晶学データ(12)を示す図である。

図22は、EB-APの構造の結晶学データ(13)を示す図である。

図23は、EB-APの構造の結晶学データ(14)を示す図である。

図24は、EB-APの構造の結晶学データ(15)を示す図である。

図25は、EB-APの構造の結晶学データ(16)を示す図である。

図26は、EB-APの構造の結晶学データ(17)を示す図である。

図27は、EB-APの構造の結晶学データ(18)を示す図である。

図28は、EB-APの構造の結晶学データ(19)を示す図である。

図29は、EB-APの構造の結晶学データ(20)を示す図である。

図30は、EB-APの構造の結晶学データ(21)を示す図である。

図31は、EB-APの構造の結晶学データ(22)を示す図である。

図32は、EB-APの構造の結晶学データ(23)を示す図である。

図33は、EB-APの構造の結晶学データ(24)を示す図である。

図34は、EB-APの構造の結晶学データ(25)を示す図である。

図35は、EB-APの構造の結晶学データ(26)を示す図である。

図 36 は、EB-AP の構造の結晶学データ (27) を示す図である。

図 37 は、EB-AP の構造の結晶学データ (28) を示す図である。

図 38 は、EB-AP の構造の結晶学データ (29) を示す図である。

図 39 は、EB-AP の構造の結晶学データ (30) を示す図である。

図 40 は、EB-AP の構造の結晶学データ (31) を示す図である。

図 41 は、EB-AP の構造の結晶学データ (32) を示す図である。

図 42 は、EB-AP の構造の結晶学データ (33) を示す図である。

図 43 は、EB-AP の構造の結晶学データ (34) を示す図である。

図 44 は、EB-AP の構造の結晶学データ (35) を示す図である。

図 45 は、EB-AP の構造の結晶学データ (36) を示す図である。

【0023】

実施例 5 野生型 EB-AP と 5'-イノシン酸の結合様式モデルの推測

イノシンの EB-AP に対する K_m 値は 100 mM を超えることから、結合様式を X 線結晶構造解析で決定できるほど親和性が高くない。実際に、グルコース-6-サルフェートやアデノシン-チオモノホスフェートといった EB-AP の阻害剤となる化合物を野生型 EB-AP の結晶にソーキングした後、X 線回折データを収集し、電子密度マップを作成したが、これら化合物に対応する電子密度は観測されなかった。そこで、コンピュータグラフィックスを用いて、5'-イノシン酸と EB-AP の結合様式の推測 (いわゆる、ドッキングスタディ) を行うこととした。プログラムは QUANTA を用いた。結晶構造中、活性部位中央に硫酸イオンが見出されたので、ここに、5'-イノシン酸のリン酸基を重ね合せた。更に、G74D 及び I153T の変異が 5'-イノシン酸の EB-AP に対する K_m 値を低下させることが知られていたので、5'-イノシン酸は G74 及び I153 から遠くないところに結合すると判断し、5'-イノシン酸の位置を決めた。その際、5'-イノシン酸を構成する原子と EB-AP を構成する原子が互いにぶつからないようにした。こうして構築したモデルにおいて、I153 が T になると、置換されたスレオニンの側鎖の γ 酸素原子とイノシンのリボースの 2' 水酸基が水素結合を形成する。また、プログラム GRASP を用いて EB-AP の静電ポテンシャル表示をしたところ、正電荷を帯びるイノシン塩基は、EB-

AP分子表面で負電荷を帯びている領域と相互作用しており、モデルがもっともらしいことが示唆された。

【0024】

実施例6 G74D/I153T変異型EB-APの結晶構造解析

G74D/I153T変異型EB-APは、ホスファターゼ活性に対するリン酸基転移活性の比率が高まっており、それに伴い、ヌクレオシド-5'-リン酸の生産能力も向上している。これは、ヌクレオシドとの K_m 値が低下したこと、すなわち、ヌクレオシドとの親和性が向上したことが原因として考えられている。この変異型EB-APの結晶構造を決定し、野生型EB-APの結晶構造と比較すれば、ヌクレオシドとの親和性向上の分子機構が解明されることを期待した。

常温で、最高2.4 Å分解能データまでのX線回折データを測定した。単位格子の体積、空間群、酵素の分子量から見積もって、非対称単位には6量体の分子1つが含まれることが予想された。そこで、野生型EB-APの6量体構造を探索モデルとして、プログラムamoreを用いて分子置換法により解析を行った。rotation searchにおいては10~3 Å分解能のデータを、translation searchにおいては10~4 Å分解能のデータを用いた。両サーチともに、正解がトップピークとして現れた。分子を剛体として精密化を行ったところ、R因子は37.3%に低下した。この後、QUANTAを用いたグラフィックス上での構造修正とX-PLORを用いた構造精密化を繰り返し行い、10~2.4 Å分解能において、R因子19.9%のモデルを得た。

実施例5と同様の方法で、5'-イノシン酸とG74D/I153T変異型EB-APの結合モデルを作成したところ、置換されたThr153の側鎖の γ 酸素原子は、イノシンのリボースの水酸基と水素結合を形成することが予想された。また、もう一つ置換が施されたAsp74を含むループの揺らぎが、野生型に比べG74D/I153T変異型EB-APの方が大きくなっていることが、温度因子を比較することにより分かった。このループはイノシンの塩基と相互作用することが予想されるが、揺らぎが大きくなったことにより塩基との結合がしやすくなった可能性が示唆される。

【0025】

実施例 7 野生型 EB-A P と モリブデン酸 と の 複合体 (反応中間体アナログ) の結晶構造解析

EB-A P の酵素反応において、まず初めに、リン酸モノエステル結合が切断され、リン酸基は活性残基の His 189 と共有結合を形成する。この状態の酵素分子を反応中間体と呼ぶ。反応中間体は速やかに、水あるいはアルコールによるアタックを受け、その結果、リン酸イオンが離脱する。水がアタックすればホスファターゼ活性が発揮されることとなり、また、アルコールがアタックすればリン酸基転移活性が発揮されることになる。いずれにしても、反応中間体は不安定であり、その構造を X 線結晶構造解析により決定することは不可能である。しかし、リン酸の代わりにモリブデン酸が His 189 に共有結合したもの (反応中間体アナログ) は、水によるアタックを受けないので安定に存在する。

リン酸基転移反応においては、反応中間体にリン酸受容体が結合し、リン酸モノエステル結合が形成される。したがって、ヌクレオシドとの結合様式を推定する目的においては、遊離型構造よりも、反応中間体構造を用いる方が適切である。反応中間体とヌクレオシドとのドッキングスタディを行う目的で、反応中間体アナログの結晶構造解析を行った。

常温にて、最高 2.4 Å 分解能データまでの X 線回折データを測定した。単位格子の体積、空間群、酵素の分子量から見積もって、非対称単位には 6 量体の半分、すなわち、サブユニット 3 つが含まれることが予想された。そこで、3 回軸によってお互いが関係づけられる 3 量体構造を作成し、分子置換法の探索モデルとした。rotation search においては 10~3 Å 分解能のデータを、translation search においては 10~4 Å 分解能のデータを用いた。両サーチともに、正解がトップピークとして現れた。分子を剛体として精密化を行ったところ、R 因子は 42.4% に低下した。この後、QUANTA を用いたグラフィックス上での構造修正と X-PLOR を用いた構造精密化を繰り返し行い、8~2.4 Å 分解能において、R 因子 22.3% のモデルを得た。非対称単位には 6 量体の分子半分、つまりサブユニット 3 つが含まれる。

【0026】

実施例 8 EB-A P 反応中間体とイノシンの結合様式モデルの推測

コンピュータグラフィックス上、QUANTAを用いて、結合様式モデルを構築した(図3)。モリブデン酸はそのままリン酸に置き換えた。イノシンは、野生型EB-A Pと5'-イノシン酸の結合様式モデルにおける5'-イノシン酸のヌクレオシド部分近くに置いた。ただし、当然のことだが、イノシンはリン酸モノエステル結合を持たないので、5'-イノシン酸をドッキングさせるよりも自由度が高い。したがって、イノシンがEB-A Pの分子表面に、より好ましい状態で結合するように、イノシンの位置の微調整を行い、結合様式モデルとした。以降の変異型酵素のデザインには、このモデルを用いることとした。

【0027】

実施例 9 ヌクレオシドとの親和性向上を目指した変異型EB-A Pのデザイン

実施例8で構築したモデルによると、Ser72の側鎖は、イノシンの塩基と相互作用する可能性が示唆された。この残基をフェニルアラニン、チロシン、トリプトファンといった芳香族アミノ酸に置換すると、芳香環とヌクレオシド塩基との間に π - π 相互作用が生じ、ヌクレオシドのEB-A Pに対する親和性が向上することが予測された。同様に、バリン、ロイシン、イソロイシンといった分岐鎖疎水性アミノ酸に置換すると、分岐鎖疎水基とヌクレオシド塩基との間にCH/ π 相互作用が生じ、また、グルタミン酸、アスパラギン酸といった負電荷を帯びたアミノ酸に置換すると、ヌクレオシド塩基の正電荷と静電的に引き合い、親和性の向上が見込まれた。そこで、ホスファターゼ活性よりもリン酸基転移活性が相対的に高まっているG74D/I153T変異型EB-A Pのリン酸基転移活性を更に高めるため、該変異型EB-A PのS72F, S72Y, S72W, S72V, S72E, S72D変異体を作製することとした。なお、コントロールとして、S72A, S72N, S72H変異体も作製することとした。ちなみに、これら9種の変異体は、3残基置換変異型EB-A Pとなる。

【0028】

実施例 10 Ser72を他の9種類のアミノ酸へ置換した3残基置換変異型EB-A Pの作製

エシェリヒア・コリJM109で発現するための9種類の変異型EB-A Pを構

築するために、G74D/I153T変異型EB-A P遺伝子を含むプラスミド pEPI340を、PCRを用いる部位特異的突然変異誘発法の鋳型として使用した。

なお、pEPI340は、プラスミドpEPI305にG74D/I153Tの変異を加えたプラスミドである。しかして、これらプラスミドpEPI305及びpEPI340の塩基配列は、特開平10-201481号公報の段落番号(0143)の表12に明記されている。また、プラスミドpEPI305をエシェリヒア・コリJM109に保持させた株は、AJ13144と命名され、通商産業省工業技術院生命工学工業技術研究所にFERM BP-5423として国際寄託されている〔上記公開公報の段落番号(0105)～(0110)の記載参照〕。

変異はストラタジーン (Stratagene) 社 (アメリカ) の「クイックチェンジ部位特異的突然変異誘発キット (Quickchange Site-Directed Mutagenesis Kit)」を使用し、製造元のプロトコールに従って、各種変異型酵素に対応するプライマー (図7) を用いて導入した。PCR反応の生成物を用いて、エシェリヒア・コリXL-1を形質転換した。形質転換細胞を、100 μ l/mlのアンピシリンを含むL寒天培地プレート上に塗抹し、37℃で16時間インキュベートした。生成したコロニーを採取し、100 μ l/mlのアンピシリンを含むL培地で一晩振とうしながら培養した。培養液から遠心分離により菌体を回収後、ファルマシア社 (スウェーデン) のFlexiPrep Kitを使用し、製造元のプロトコールに従って、プラスミドの抽出を行った。各種3残基置換変異型EB-A Pをコードする塩基配列は、DNA配列分析によって確認した。

なお、図7に示したプライマーセットの合成は(株)日本バイオサービスに委託した。

【0029】

実施例11 変異型EB-A Pのリン酸基転移活性及び反応速度定数の測定

各種3残基置換変異型EB-A P遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を100 μ l/mlのアンピシリンを含むL培地50mlに接種し、37℃で16時間培養した。培養液から遠心分離で菌体を集め、25mMリン酸バッファー(pH7.0)3mlに懸濁し、4℃で20分間超音波処理を

行い破碎した。処理液を遠心分離して不溶性画分を除き、無細胞抽出液を調製した。各EB-AP 3残基置換変異型酵素が発現していることは、SDS-PAGEで確認した。発現量は、全蛋白質の20%程度であった。

無細胞抽出液のリン酸基転移活性は以下の条件で測定した。2 mMイノシン、100 mMピロリン酸ナトリウム、100 mM酢酸バッファー(pH 4.0)、100 μ lの無細胞抽出液を含む反応液(1 ml)を、pH 4、30℃で10分間インキュベートした。1 N塩酸200 μ lを加え反応を停止させた後、遠心分離により沈殿を除き、生成した5'-イノシン酸を定量した。各種3残基置換変異型EB-APのリン酸基転移活性を、変異を導入する対象としたG74D/I153T変異型EB-APを用いたときの5'-イノシン酸生成量を1とした相対活性で示した。

続いて、各種3残基置換変異型EB-APのリン酸基転移反応におけるイノシンに対する K_m 値を以下の条件で測定した。100 mMピロリン酸ナトリウム、100 mM酢酸バッファー(pH 4.0)、10-100 mMイノシン、100 μ lの無細胞抽出液を含む反応液(1 ml)をpH 4、30℃で10分間インキュベートした。1 N塩酸200 μ lを加え反応を停止させた後、遠心分離により沈殿を除き、生成した5'-イノシン酸を定量した。Hanes-Woolfプロットにより K_m 値を算出した。表2に結果を示す。

【0030】

【表 2】

| | K _m 値 | リン酸基転移活性 |
|-----------------|------------------|----------|
| S72F/G74D/I153T | 20mM | 2.80 |
| S72Y/G74D/I153T | 25mM | 2.04 |
| S72W/G74D/I153T | 30mM | 1.71 |
| S72V/G74D/I153T | 40mM | 2.46 |
| S72E/G74D/I153T | 40mM | 3.19 |
| S72D/G74D/I153T | 33mM | 1.59 |
| S72A/G74D/I153T | 115mM | 0.78 |
| S72N/G74D/I153T | 124mM | 0.43 |
| S72H/G74D/I153T | n. d. | n. d. |
| G74D/I153T | 100mM | 1.00 |
| 10残基置換変異型 | 40mM | 1.44 |

【0031】

実施例 9 にて、 π - π 相互作用、CH/ π 相互作用、静電相互作用によりイノシンとの親和性が向上するであろうと予測されたすべての変異体(S72F, S72Y, S72W, S72V, S72E, S72D)のイノシンに対するK_m値が、変異導入しないG74D/I153T変異型EB-APのものに比べて低下し、イノシンに対する親和性が向上した。また、リン酸基転移活性についても向上が見られた。特に、S72Fを導入した変異体が、K_m値、リン酸基転移活性、双方において、改善が著しかった。フェニルアラニンの芳香環とイノシン塩基が適当な位置関係で π - π 相互作用し、親和性の向上が図られたものと推測される。

なお、5'-イノシン酸は、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)により、下記の条件にて分析した。

カラム: Cosmosil 5 C18-AR (4.6 × 150 mm) ナカライテスク社製品

移動相: 5 mM リン酸カリウムバッファー(pH 2.8)/メタノール = 95/

5

流速: 1.0 ml/min

温度: 室温

検出: UV 245 nm

【0032】

実施例 12 S72F/G74D/I153T変異型EB-AP遺伝子を導入し

たエシェリヒア・コリJM109を用いた5'-イノシン酸の生産

G74D/I153T変異型、10残基置換変異型、及びS72F/G74D/I153T変異型EB-AP遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109をアンピシリン100 μ g/ml及びIPTG 1mMを含むL培地50 mlに接種し、37℃で16時間培養した。

ピロリン酸12 g/dl、及びイノシン6 g/dlを酢酸バッファー (pH 4.0) に溶解し、これに上記の各変異型EB-AP遺伝子を導入したエシェリヒア・コリJM109の菌体を乾燥菌体重量で100 mg/dlとなるように添加し、pHを4.0に維持しながら、30℃で24時間反応を行った。生成した5'-イノシン酸の量を測定した結果を表3に示した。なお、生成したイノシン酸は5'-イノシン酸のみで2'-イノシン酸及び3'-イノシン酸の副生は全く認められなかった。

G74D/I153T変異型EB-AP遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を用いた反応では7.5 g/dlの5'-イノシン酸が生成蓄積したが、反応時間を伸ばしてもそれ以上蓄積は増加しなかった。10残基置換変異型EB-AP遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を用いた反応では蓄積が向上し、12.1 g/dlの5'-イノシン酸が生成蓄積した。立体構造に基づいて設計し、構築したS72F/G74D/I153T変異型EB-AP遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を用いた反応では更に生産性が向上し、13.2 g/dlの5'-イノシン酸が生成蓄積した。

【0033】

【表 3】

| 導入した変異型酵素遺伝子 | 生成イノシン酸 (g/dl) |
|-----------------|----------------|
| G74D/I153T | 7.5 |
| 10残基置換変異型 | 12.1 |
| S72F/G74D/I153T | 13.2 |

【0034】

実施例 13 L16W, S71W, S73W, E104F, E104W 変異を導入した 3 残基置換変異型 EB-A P のリン酸基転移活性及び反応速度定数の測定

S72F 変異が、 $\pi-\pi$ 相互作用によりイノシンとの親和性を向上させたと考えられるため、コンピューターグラフィックス上で、芳香環アミノ酸への置換によりイノシン塩基との $\pi-\pi$ 相互作用が図れる他のアミノ酸残基を探索した。その結果、L16W, S71W, S73W, E104F, E104W 変異により置換された芳香環がイノシン塩基と相互作用する可能性が示唆された。そこで、これら 5 種の (G74D/I153T 変異型 EB-A P をベースとした) 3 残基置換変異型 EB-A P を実施例 10 に記述した方法 (各変異型酵素に対応するプライマーは図 8 に示した) で作製し、実施例 11 に記述した方法でリン酸基転移活性及び反応速度定数を測定した。結果を表 4 に示す。リン酸基転移活性はいずれの変異型酵素においても低下したが、 K_m 値はすべての変異型酵素で低下し、イノシンとの親和性が向上したことが示唆された。Leu16 は、イノシンとの相互作用が確実視される Ser72 から ($C\alpha$ 間距離で) 10 Å 離れているが、この程度離れていてもイノシンとの相互作用が可能であることが示された。

なお、図 8 に示したプライマーセットの合成は、(株)日本バイオサービスに委託した。

【0035】

【表 4】

| | Km値 | リン酸基転移活性 |
|------------------|-------|----------|
| L16W/G74D/I153T | 33mM | 0.21 |
| S71W/G74D/I153T | 75mM | 0.26 |
| S73W/G74D/I153T | 29mM | 0.77 |
| E104F/G74D/I153T | 61mM | 0.65 |
| E104W/G74D/I153T | 67mM | 0.26 |
| G74D/I153T | 100mM | 1.00 |
| 10残基置換変異型酵素 | 40mM | 1.44 |

【0036】

実施例 14 エンテロバクター・アエロゲネス(Enterobacter aerogenes)由来酸性ホスファターゼ (E A-A P)の変異型酵素遺伝子の作製と該遺伝子を導入したエシェリヒア・コリJM109を用いた5'-イノシン酸の生産

EB-A Pにおいてイノシンのリン酸基転移活性を向上させたS72F/G74D/I153Tの3つの変異に相同な変異をEA-A Pに導入することとした。EB-A PとEA-A Pのアミノ酸配列をプログラムBLASTを用いて、アラインメントした結果を図9に示す。EB-A PのSer72/Gly74/Ile153は、EA-A Pにおいては、Ala72/Gly74/Ile153に対応することが示された。そこで、A72F/G74D/I153T変異型EA-A Pを実施例10に記述した方法で作製した。変異型酵素遺伝子を含むプラスミドを導入したエシェリヒア・コリJM109を用いて、イノシンから5'-イノシン酸の生産を実施例12に記述した方法で行った。結果を表5に示す。A72F/G74D/I153T変異型EA-A Pは、S72F/G74D/I153T変異型EB-A Pと同等の5'-イノシン酸生産能を示した。

【0037】

【表 5】

| 導入した変異型酵素遺伝子 | 生成イノシン酸 (g/dl) |
|-----------------------|----------------|
| EA-AP A72F/G74D/I153T | 13.1 |
| EB-AP S72F/G74D/I153T | 13.2 |

【0038】

なお、図9はEB-APとエンテロバクター・アエロゲネス由来酸性ホスファターゼ (EB-AP) のアミノ酸配列アラインメントをプログラムBLASTにより行った結果を示す図である。上段がEB-AP、下段がEA-APである。中段には、両者のアミノ酸残基が同一であればその残基名が、同一でなくても類似のアミノ酸残基であれば、+が表示される。72番目の残基の位置は、[72]でマークした、EB-APではSer、EA-APではAlaである。

【0039】

【発明の効果】

以上詳細に説明したように、本発明によれば、ヌクレオシド-5'-リン酸生産能が向上した変異型ヌクレオシド-5'-リン酸生産酵素、及びその製造方法が提供される。また、本発明によれば、ヌクレオシド-5'-リン酸の製造方法に有用な、前記の変異型酵素をコードする遺伝子、該遺伝子を含む組換えDNA、該組換えDNAを保有する微生物が提供される。

更に、X線結晶構造解析技術によりタンパク質の新規立体構造の解明に成功した。

【図面の簡単な説明】

【図1】

ホスファターゼ活性あるいはリン酸基転移活性を有する活性部位の構成要素となる5つのアミノ酸残基と、これらの空間的位置関係をC α 原子間の距離として示した図である。

【図2】

EB-APのアミノ酸配列を、モルガネラ・モルガニ、サルモネラ・チフィム

リウム、ザイモモナス・モピリス由来酸性ホスファターゼのアミノ酸配列とアラインメントした図である。

【図 3】

EB-A P 反応中間体アナログとイノシンの結合様式モデルの結晶構造を示すコンピューターグラフィックス (CG) の写真である。

【図 4】

EB-A P の 6 量体分子の結晶構造を示す CG の写真である。

【図 5】

EB-A P のサブユニットの結晶構造を示す CG の写真である。

【図 6】

EB-A P の活性部位構造を示す図である。

【図 7】

部位特異的突然変異誘発法に使用したプライマーセットを示す図である。

【図 8】

部位特異的突然変異誘発法に使用したプライマーセットを示す図である。

【図 9】

EB-A P とエンテロバクター・アエロゲネス由来酸性ホスファターゼ (EA-A P) のアミノ酸配列アラインメントをプログラム BLAST により行った結果を示す図である。

【図 10】

EB-A P の構造の結晶学データ (1) を示す図である。

【図 11】

EB-A P の構造の結晶学データ (2) を示す図である。

【図 12】

EB-A P の構造の結晶学データ (3) を示す図である。

【図 13】

EB-A P の構造の結晶学データ (4) を示す図である。

【図 14】

EB-A P の構造の結晶学データ (5) を示す図である。

【図 1 5】

EB - AP の構造の結晶学データ (6) を示す図である。

【図 1 6】

EB - AP の構造の結晶学データ (7) を示す図である。

【図 1 7】

EB - AP の構造の結晶学データ (8) を示す図である。

【図 1 8】

EB - AP の構造の結晶学データ (9) を示す図である。

【図 1 9】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 0) を示す図である。

【図 2 0】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 1) を示す図である。

【図 2 1】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 2) を示す図である。

【図 2 2】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 3) を示す図である。

【図 2 3】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 4) を示す図である。

【図 2 4】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 5) を示す図である。

【図 2 5】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 6) を示す図である。

【図 2 6】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 7) を示す図である。

【図 2 7】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 8) を示す図である。

【図 2 8】

EB - AP の構造の結晶学データ (1 9) を示す図である。

【図 2 9】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 0) を示す図である。

【図 3 0】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 1) を示す図である。

【図 3 1】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 2) を示す図である。

【図 3 2】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 3) を示す図である。

【図 3 3】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 4) を示す図である。

【図 3 4】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 5) を示す図である。

【図 3 5】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 6) を示す図である。

【図 3 6】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 7) を示す図である。

【図 3 7】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 8) を示す図である。

【図 3 8】

EB-A Pの構造の結晶学データ (2 9) を示す図である。

【図 3 9】

EB-A Pの構造の結晶学データ (3 0) を示す図である。

【図 4 0】

EB-A Pの構造の結晶学データ (3 1) を示す図である。

【図 4 1】

EB-A Pの構造の結晶学データ (3 2) を示す図である。

【図 4 2】

EB-A Pの構造の結晶学データ (3 3) を示す図である。

【図 4 3】

EB-A Pの構造の結晶学データ (3 4) を示す図である。

【図 4 4】

EB - AP の構造の結晶学データ (3 5) を示す図である。

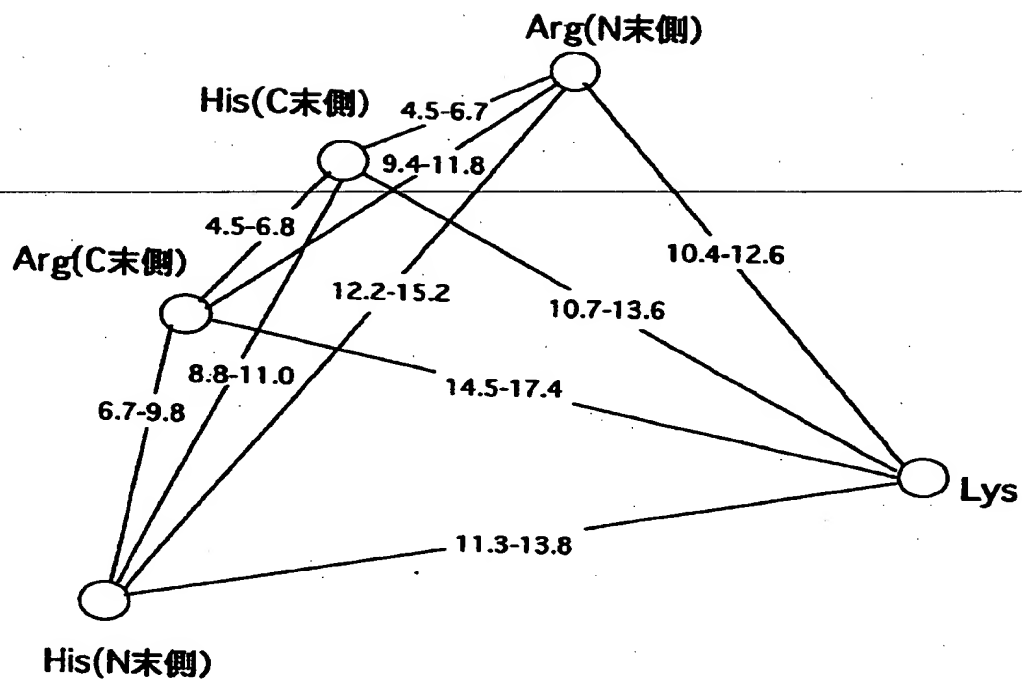
【図 4 5】

EB - AP の構造の結晶学データ (3 6) を示す図である。

【書類名】

図面

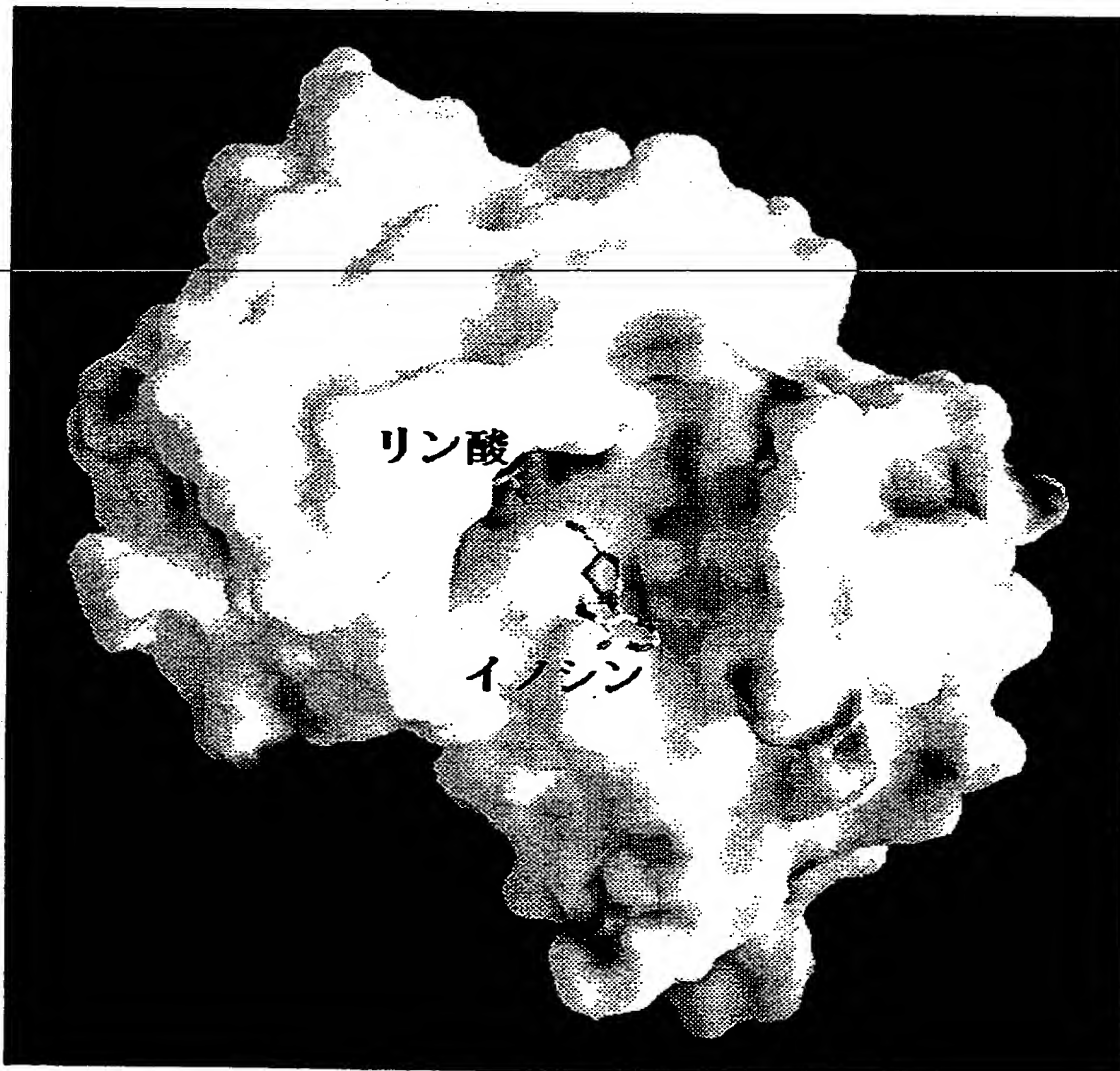
【図 1】



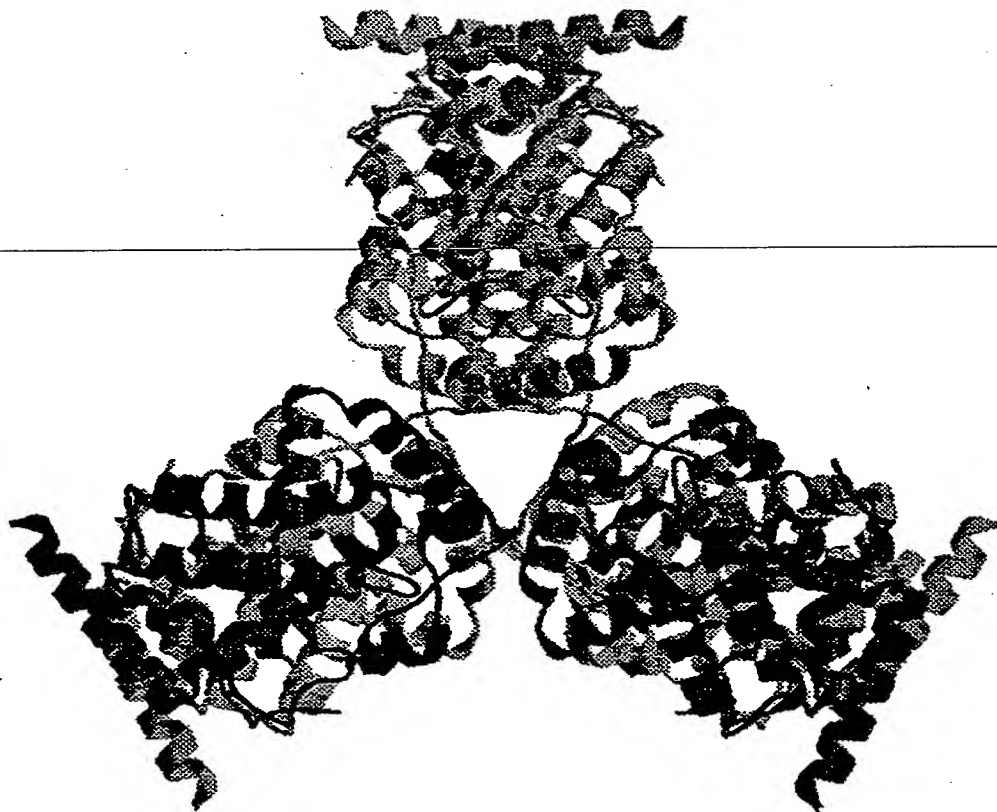
【图 2】

| | α1 | α2 | α3 |
|-----------------------|---|-----|-----|
| <i>E. blattae</i> | :LALVATGNDT TTKPDLYLK NSEAINSLAL LPPPPAVGSI AFLNDOAMEY QGRLLRNTER GKLAEDANL 70 | | |
| <i>M. morganii</i> | : AIPAGNDA TTKPDLYLK NEQAIDSLKL LPPPEVGS I QFLNDOAMEY KGRMLRNTER GKQQAQADADL | | |
| <i>S. typhimurium</i> | : KYT SAETVQFFHS PEESVNSQFY LPPPPGNDGP AYRYDKEAYF KGVAILGSPR WKQQAEDADV | | |
| <i>S. mobilis</i> | :ASGLSQSVSA HTEKSEPSST YHFDSDPLLY LAPPPTS GSP LQAHDDQTFN STRQLKGSTR WALATQDADL * ** | | |
| | α4 | α5 | α6 |
| <i>E. blattae</i> | :SSGGVANAFS GAFGSPITEK DAPALHKLLT NMIEDAGDLA TRSAKOHYMR IRPFIFYGVS TCNTTEQDKL 140 | | |
| <i>M. morganii</i> | :AAGGVATAFS GAFGYPITEK DSPELYKLLT NMIEDAGDLA TRSAKEHYMR IRPFIFYGTE TCNTKDQKKL | | |
| <i>S. typhimurium</i> | :SVENIARIFS PVVGAKINPK DTPETWNMLK NLLTMGGYYA TASAKKYMR TRPFVLFNHS TCRPEDENTL | | |
| <i>S. mobilis</i> | :HLASVLKDYA CAAGMNLDA QLPHLANLIK RALRTEYDDI GR-KNNMNR KREFVDTDQP ICTEKDREGL * | | |
| | α7 | α8 | α9 |
| | | | |
| | α10 | α11 | α12 |
| <i>E. blattae</i> | :SKNGSYPSGH TSIGWATALV LAEINPQRQN EILKRGYELG QSRVICGYHW QSHVDAARVV GSAVATLHT 210 | | |
| <i>M. morganii</i> | :STNGSYPSGH TSIGWATALV LAEYNPANQD AILERGYQLG QSRVICGYHW QSHVDAARIV GSAAVATLHS | | |
| <i>S. typhimurium</i> | :RKNGSYPSGH TAYGTLALV LSEARPERAQ ELARRGWFG QSRVICGAHW QSHVDAGRIV GAVEFARLOT | | |
| <i>S. mobilis</i> | :GKQGSYPSGH TTIGWSVALI LAELIPDBAA NILQRQIFG TSRIVCGAHW FSDVQAGYIM ASGEIAALHG * | | |
| | α13 | | |
| <i>E. blattae</i> | :NPAFOOQLOK AKAEFAQHOK K | | |
| <i>M. morganii</i> | :DPAFOAQLAK AKQEFACKSQ K | | |
| <i>S. typhimurium</i> | :IPAFOKSLAK VREELNDKNN LLSKEDHPKL NY | | |
| <i>S. mobilis</i> | :DADFRDMEL ARKELEKART SAHTPDDLLC KIEQSAR * | | |

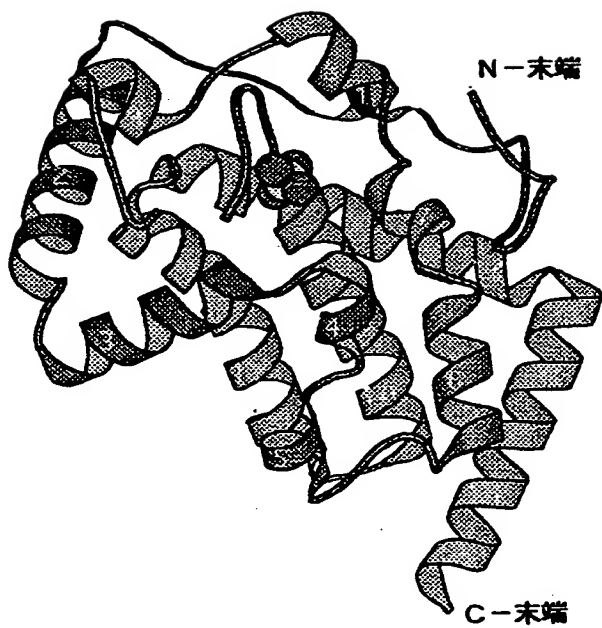
【図 3】



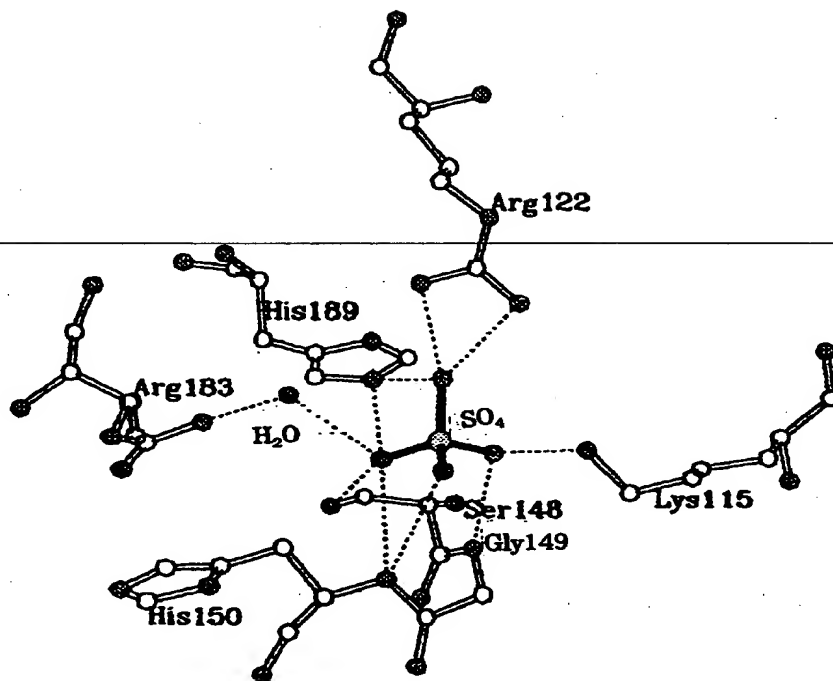
【図 4】



【図 5】



【図 6】



【図 7】

| | |
|----------|---|
| S72F(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-TTT-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72F(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-AAA-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S F72 G D V |
| S72Y(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-TAC-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72Y(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-ATG-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S Y72 G D V |
| S72W(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-TGG-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72W(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-ACC-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S W72 G D V |
| S72V(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-GTT-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72V(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-CAA-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S V72 G D V |
| S72E(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-GAA-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72E(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-CTT-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S E72 G D V |
| S72D(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-GAC-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72D(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-CTG-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S D72 G D V |
| S72A(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-GCG-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72A(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-CGC-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S A72 G D V |
| S72N(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-AAC-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72N(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-TTG-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S N72 G D V |
| S72H(s) | 5'-CA-AAC-CTG-AGC-CAC-GGC-GAT-GTG-GC-3' |
| S72H(as) | 3'-GT-TTG-GAC-TCG-GTG-CCG-CTA-CAC-CG-5' |
| | N L S H72 G D V |

【图 8】

| | |
|-----------|---|
| L16W(s) | 5'-CG-AAA-CCG-GAT-TGG-TAC-TAC-CTC-AA-3' |
| L16W(as) | 3'-GC-TTT-GGC-CTA-ACC-ATG-ATG-GAG-TT-5' |
| | K P D W16 Y Y L |
| S71W(s) | 5'-AT-GCA-AAC-CTG-TGG-AGT-GGC-GAT-GT-3' |
| S71W(as) | 3'-TA-CGT-TTG-GAC-ACC-TCA-CCG-CTA-CA-5' |
| | A N L W71 S G D |
| G73W(s) | 5'-AC-CTG-AGC-AGT-TGG-GAT-GTG-GCG-AA-3' |
| G73W(as) | 3'-TG-GAC-TCG-TCA-ACC-CTA-CAC-CGC-TT-5' |
| | L S S W73 D V A |
| E104F(s) | 5'-CC-AAT-ATG-ATT-TTT-GAC-GCC-GGG-GA-3' |
| E104F(as) | 3'-GG-TTA-TAC-TAA-AAA-CTG-CGG-CCC-CT-5' |
| | N M I F104 D A G |
| E104W(s) | 5'-CC-AAT-ATG-ATT-TGG-GAC-GCC-GGG-GA-3' |
| E104W(as) | 3'-GG-TTA-TAC-TAA-ACC-CTG-CGG-CCC-CT-5' |
| | N M I W104 D A G |

【图 9】

| | |
|--------|---|
| EB-AP: | ALVATGNDTTTKPDLYYLKNSEAINSLALLPPPPAVGSIAFLNDQAMYEQGRLLRNTERG |
| | ALV GND TTKPDLYYLKN++AI+SLALLPPPP VGSIAFLNDQAMYE+GRLLRNTERG |
| EA-AP: | ALVPAGNDATTKPDLYYLKNAQAIDSLALLPPPPPEVGSIAFLNDQAMYEKGRLLRNTERG |
| | [72] |
| EB-AP: | KLAAEDANLSSGGVANAFSGAFGSPITEKDAPALHKLLTNMIEDAGDLATRSADHYMRI |
| | KLAAEDANLS+GGVANAFS AFGSPITEKDAP LHKLLTNMIEDAGDLATRSAD+ YMRI |
| EA-AP: | KLAAEDANLSAGGVANAFSSAFGSPITEKDAPQLHKLLTNMIEDAGDLATRSADKEYMRI |
| EB-AP: | RPFAFYGVSTCNTTEQDKLSKNGSYPSGHTSIGWATALVLAEINPQRONEILKRGYELGO |
| | RPFAFYGVSTCNTTEQDKLSKNGSYPSGHTSIGWATALVLAEINPQRONEILKRGYELG+ |
| EA-AP: | RPFAFYGVSTCNTTEQDKLSKNGSYPSGHTSIGWATALVLAEINPQRONEILKRGYELGE |
| EB-AP: | SRVICGYHWQSDVDAARVVGSAAVATLHTNPAFQQQLQKAKAEFAQHOK |
| | SRVICGYHWQSDVDAAR+VGSAAVATLHTNPAFQQQLQKAK EFA+ QK |
| EA-AP: | SRVICGYHWQSDVDAARIVGSAAVATLHTNPAFQQQLQKAKDEFARTQK |

【図 1 0】

| | | | | | | | | | |
|------|----|-----|-------|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1 | N | GLY A | 7 | 35.965 | 71.208 | 89.712 | 1.00 | 36.57 |
| ATOM | 2 | CA | GLY A | 7 | 37.459 | 71.295 | 89.574 | 1.00 | 31.92 |
| ATOM | 3 | C | GLY A | 7 | 38.160 | 69.982 | 89.872 | 1.00 | 29.76 |
| ATOM | 4 | O | GLY A | 7 | 39.301 | 69.858 | 89.492 | 1.00 | 31.81 |
| ATOM | 5 | N | ASN A | 8 | 37.485 | 68.990 | 90.532 | 1.00 | 26.40 |
| ATOM | 6 | CA | ASN A | 8 | 38.284 | 67.775 | 90.697 | 1.00 | 26.63 |
| ATOM | 7 | C | ASN A | 8 | 38.466 | 67.018 | 89.396 | 1.00 | 29.21 |
| ATOM | 8 | O | ASN A | 8 | 37.736 | 67.238 | 88.431 | 1.00 | 30.52 |
| ATOM | 9 | CB | ASN A | 8 | 37.677 | 66.810 | 91.702 | 1.00 | 27.01 |
| ATOM | 10 | CG | ASN A | 8 | 37.725 | 67.396 | 93.104 | 1.00 | 32.45 |
| ATOM | 11 | OD1 | ASN A | 8 | 38.751 | 67.744 | 93.636 | 1.00 | 30.02 |
| ATOM | 12 | ND2 | ASN A | 8 | 36.545 | 67.536 | 93.707 | 1.00 | 31.60 |
| ATOM | 13 | N | ASP A | 9 | 39.455 | 66.154 | 89.463 | 1.00 | 29.14 |
| ATOM | 14 | CA | ASP A | 9 | 39.787 | 65.216 | 88.391 | 1.00 | 30.47 |
| ATOM | 15 | C | ASP A | 9 | 40.661 | 64.081 | 88.901 | 1.00 | 31.02 |
| ATOM | 16 | O | ASP A | 9 | 40.804 | 63.931 | 90.110 | 1.00 | 31.00 |
| ATOM | 17 | CB | ASP A | 9 | 40.394 | 65.960 | 87.195 | 1.00 | 30.92 |
| ATOM | 18 | CG | ASP A | 9 | 41.802 | 66.484 | 87.429 | 1.00 | 32.66 |
| ATOM | 19 | OD1 | ASP A | 9 | 42.307 | 66.333 | 88.532 | 1.00 | 35.03 |
| ATOM | 20 | OD2 | ASP A | 9 | 42.400 | 67.018 | 86.493 | 1.00 | 31.63 |
| ATOM | 21 | N | THR A | 10 | 41.272 | 63.298 | 87.998 | 1.00 | 28.72 |
| ATOM | 22 | CA | THR A | 10 | 42.188 | 62.228 | 88.430 | 1.00 | 28.53 |
| ATOM | 23 | C | THR A | 10 | 43.408 | 62.655 | 89.259 | 1.00 | 30.10 |
| ATOM | 24 | O | THR A | 10 | 43.946 | 61.944 | 90.095 | 1.00 | 29.06 |
| ATOM | 25 | CB | THR A | 10 | 42.692 | 61.405 | 87.235 | 1.00 | 26.05 |
| ATOM | 26 | OG1 | THR A | 10 | 43.272 | 60.172 | 87.655 | 1.00 | 27.75 |
| ATOM | 27 | CG2 | THR A | 10 | 43.670 | 62.174 | 86.313 | 1.00 | 23.76 |
| ATOM | 28 | N | THR A | 11 | 43.814 | 63.900 | 88.996 | 1.00 | 30.82 |
| ATOM | 29 | CA | THR A | 11 | 44.932 | 64.389 | 89.799 | 1.00 | 32.79 |
| ATOM | 30 | C | THR A | 11 | 44.605 | 64.736 | 91.267 | 1.00 | 36.32 |
| ATOM | 31 | O | THR A | 11 | 45.435 | 64.658 | 92.162 | 1.00 | 37.21 |
| ATOM | 32 | CB | THR A | 11 | 45.588 | 65.591 | 89.143 | 1.00 | 30.53 |
| ATOM | 33 | OG1 | THR A | 11 | 44.845 | 66.781 | 89.359 | 1.00 | 27.79 |
| ATOM | 34 | CG2 | THR A | 11 | 45.899 | 65.362 | 87.656 | 1.00 | 32.16 |
| ATOM | 35 | N | THR A | 12 | 43.317 | 65.076 | 91.495 | 1.00 | 34.81 |
| ATOM | 36 | CA | THR A | 12 | 42.910 | 65.213 | 92.900 | 1.00 | 32.91 |
| ATOM | 37 | C | THR A | 12 | 42.265 | 63.992 | 93.549 | 1.00 | 33.08 |
| ATOM | 38 | O | THR A | 12 | 42.350 | 63.742 | 94.736 | 1.00 | 32.49 |
| ATOM | 39 | CB | THR A | 12 | 41.963 | 66.395 | 93.077 | 1.00 | 30.92 |
| ATOM | 40 | OG1 | THR A | 12 | 40.719 | 66.162 | 92.409 | 1.00 | 32.04 |
| ATOM | 41 | CG2 | THR A | 12 | 42.599 | 67.667 | 92.543 | 1.00 | 29.75 |
| ATOM | 42 | N | LYS A | 13 | 41.565 | 63.229 | 92.703 | 1.00 | 31.17 |
| ATOM | 43 | CA | LYS A | 13 | 40.791 | 62.064 | 93.174 | 1.00 | 30.27 |
| ATOM | 44 | C | LYS A | 13 | 40.904 | 60.812 | 92.287 | 1.00 | 31.40 |
| ATOM | 45 | O | LYS A | 13 | 39.981 | 60.348 | 91.605 | 1.00 | 33.05 |
| ATOM | 46 | CB | LYS A | 13 | 39.294 | 62.395 | 93.331 | 1.00 | 29.09 |
| ATOM | 47 | CG | LYS A | 13 | 39.001 | 63.747 | 93.965 | 1.00 | 32.97 |
| ATOM | 48 | CD | LYS A | 13 | 37.536 | 64.076 | 94.166 | 1.00 | 37.86 |
| ATOM | 49 | CE | LYS A | 13 | 36.767 | 62.909 | 94.772 | 1.00 | 47.28 |
| ATOM | 50 | NZ | LYS A | 13 | 35.340 | 63.270 | 94.947 | 1.00 | 52.08 |
| ATOM | 51 | N | PRO A | 14 | 42.138 | 60.283 | 92.279 | 1.00 | 33.01 |
| ATOM | 52 | CA | PRO A | 14 | 42.516 | 59.249 | 91.290 | 1.00 | 32.06 |
| ATOM | 53 | C | PRO A | 14 | 41.823 | 57.907 | 91.452 | 1.00 | 30.98 |
| ATOM | 54 | O | PRO A | 14 | 41.961 | 56.989 | 90.668 | 1.00 | 32.57 |

【図 1 1】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 55 | CB | PRO | A | 14 | 44.035 | 59.145 | 91.468 | 1.00 | 34.46 |
| ATOM | 56 | CG | PRO | A | 14 | 44.283 | 59.564 | 92.920 | 1.00 | 33.02 |
| ATOM | 57 | CD | PRO | A | 14 | 43.225 | 60.638 | 93.181 | 1.00 | 34.46 |
| ATOM | 58 | N | ASP | A | 15 | 41.046 | 57.815 | 92.513 | 1.00 | 29.27 |
| ATOM | 59 | CA | ASP | A | 15 | 40.204 | 56.655 | 92.809 | 1.00 | 28.89 |
| ATOM | 60 | C | ASP | A | 15 | 38.810 | 56.684 | 92.146 | 1.00 | 21.76 |
| ATOM | 61 | O | ASP | A | 15 | 38.078 | 55.706 | 92.030 | 1.00 | 20.59 |
| ATOM | 62 | CB | ASP | A | 15 | 40.125 | 56.599 | 94.368 | 1.00 | 37.60 |
| ATOM | 63 | CG | ASP | A | 15 | 39.589 | 57.903 | 95.080 | 1.00 | 45.11 |
| ATOM | 64 | OD1 | ASP | A | 15 | 40.062 | 59.044 | 94.817 | 1.00 | 45.67 |
| ATOM | 65 | OD2 | ASP | A | 15 | 38.687 | 57.751 | 95.922 | 1.00 | 49.07 |
| ATOM | 66 | N | LEU | A | 16 | 38.495 | 57.910 | 91.726 | 1.00 | 20.49 |
| ATOM | 67 | CA | LEU | A | 16 | 37.182 | 58.179 | 91.135 | 1.00 | 23.90 |
| ATOM | 68 | C | LEU | A | 16 | 37.156 | 58.814 | 89.727 | 1.00 | 22.23 |
| ATOM | 69 | O | LEU | A | 16 | 36.109 | 59.011 | 89.134 | 1.00 | 23.21 |
| ATOM | 70 | CB | LEU | A | 16 | 36.354 | 59.099 | 92.029 | 1.00 | 23.35 |
| ATOM | 71 | CG | LEU | A | 16 | 35.814 | 58.432 | 93.297 | 1.00 | 25.48 |
| ATOM | 72 | CD1 | LEU | A | 16 | 34.876 | 57.253 | 93.075 | 1.00 | 24.05 |
| ATOM | 73 | CD2 | LEU | A | 16 | 35.092 | 59.477 | 94.104 | 1.00 | 25.22 |
| ATOM | 74 | N | TYR | A | 17 | 38.343 | 59.175 | 89.273 | 1.00 | 20.96 |
| ATOM | 75 | CA | TYR | A | 17 | 38.555 | 59.605 | 87.889 | 1.00 | 22.04 |
| ATOM | 76 | C | TYR | A | 17 | 39.780 | 58.903 | 87.334 | 1.00 | 22.80 |
| ATOM | 77 | O | TYR | A | 17 | 40.790 | 58.799 | 88.021 | 1.00 | 23.48 |
| ATOM | 78 | CB | TYR | A | 17 | 38.856 | 61.095 | 87.711 | 1.00 | 18.01 |
| ATOM | 79 | CG | TYR | A | 17 | 37.928 | 62.099 | 88.371 | 1.00 | 24.78 |
| ATOM | 80 | CD1 | TYR | A | 17 | 37.129 | 62.916 | 87.542 | 1.00 | 22.78 |
| ATOM | 81 | CD2 | TYR | A | 17 | 37.905 | 62.248 | 89.781 | 1.00 | 23.58 |
| ATOM | 82 | CE1 | TYR | A | 17 | 36.317 | 63.919 | 88.113 | 1.00 | 26.51 |
| ATOM | 83 | CE2 | TYR | A | 17 | 37.090 | 63.240 | 90.349 | 1.00 | 22.88 |
| ATOM | 84 | CZ | TYR | A | 17 | 36.303 | 64.059 | 89.517 | 1.00 | 24.63 |
| ATOM | 85 | OH | TYR | A | 17 | 35.482 | 65.023 | 90.066 | 1.00 | 22.92 |
| ATOM | 86 | N | TYR | A | 18 | 39.670 | 58.482 | 86.053 | 1.00 | 26.17 |
| ATOM | 87 | CA | TYR | A | 18 | 40.838 | 58.209 | 85.191 | 1.00 | 21.13 |
| ATOM | 88 | C | TYR | A | 18 | 41.332 | 59.414 | 84.464 | 1.00 | 19.92 |
| ATOM | 89 | O | TYR | A | 18 | 42.490 | 59.511 | 84.083 | 1.00 | 22.64 |
| ATOM | 90 | CB | TYR | A | 18 | 40.563 | 57.195 | 84.080 | 1.00 | 17.53 |
| ATOM | 91 | CG | TYR | A | 18 | 40.312 | 55.826 | 84.610 | 1.00 | 16.91 |
| ATOM | 92 | CD1 | TYR | A | 18 | 41.425 | 55.028 | 84.916 | 1.00 | 19.86 |
| ATOM | 93 | CD2 | TYR | A | 18 | 38.985 | 55.372 | 84.771 | 1.00 | 16.65 |
| ATOM | 94 | CE1 | TYR | A | 18 | 41.218 | 53.725 | 85.383 | 1.00 | 18.64 |
| ATOM | 95 | CE2 | TYR | A | 18 | 38.765 | 54.053 | 85.213 | 1.00 | 17.52 |
| ATOM | 96 | CZ | TYR | A | 18 | 39.892 | 53.262 | 85.515 | 1.00 | 21.18 |
| ATOM | 97 | OH | TYR | A | 18 | 39.734 | 51.974 | 85.977 | 1.00 | 26.15 |
| ATOM | 98 | N | LEU | A | 19 | 40.412 | 60.336 | 84.236 | 1.00 | 21.49 |
| ATOM | 99 | CA | LEU | A | 19 | 40.788 | 61.462 | 83.366 | 1.00 | 22.71 |
| ATOM | 100 | C | LEU | A | 19 | 41.094 | 62.812 | 84.021 | 1.00 | 25.01 |
| ATOM | 101 | O | LEU | A | 19 | 40.771 | 63.125 | 85.159 | 1.00 | 25.24 |
| ATOM | 102 | CB | LEU | A | 19 | 39.708 | 61.669 | 82.290 | 1.00 | 21.68 |
| ATOM | 103 | CG | LEU | A | 19 | 39.301 | 60.442 | 81.432 | 1.00 | 22.88 |
| ATOM | 104 | CD1 | LEU | A | 19 | 40.430 | 59.842 | 80.583 | 1.00 | 20.39 |
| ATOM | 105 | CD2 | LEU | A | 19 | 38.078 | 60.812 | 80.608 | 1.00 | 18.83 |
| ATOM | 106 | N | LYS | A | 20 | 41.736 | 63.667 | 83.246 | 1.00 | 26.44 |
| ATOM | 107 | CA | LYS | A | 20 | 41.947 | 65.032 | 83.717 | 1.00 | 26.77 |
| ATOM | 108 | C | LYS | A | 20 | 40.935 | 66.034 | 83.292 | 1.00 | 26.42 |

【図 1 2】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 109 | O | LYS | A | 20 | 40.182 | 65.870 | 82.341 | 1.00 | 29.05 |
| ATOM | 110 | CB | LYS | A | 20 | 43.239 | 65.608 | 83.187 | 1.00 | 30.61 |
| ATOM | 111 | CG | LYS | A | 20 | 44.400 | 64.791 | 83.648 | 1.00 | 32.90 |
| ATOM | 112 | CD | LYS | A | 20 | 45.633 | 65.326 | 82.963 | 1.00 | 39.72 |
| ATOM | 113 | CE | LYS | A | 20 | 46.698 | 64.259 | 83.113 | 1.00 | 50.27 |
| ATOM | 114 | NZ | LYS | A | 20 | 46.148 | 62.977 | 82.610 | 1.00 | 62.00 |
| ATOM | 115 | N | ASN | A | 21 | 41.050 | 67.184 | 83.943 | 1.00 | 24.09 |
| ATOM | 116 | CA | ASN | A | 21 | 40.154 | 68.246 | 83.530 | 1.00 | 23.98 |
| ATOM | 117 | C | ASN | A | 21 | 40.177 | 68.539 | 82.032 | 1.00 | 25.08 |
| ATOM | 118 | O | ASN | A | 21 | 39.134 | 68.722 | 81.427 | 1.00 | 25.36 |
| ATOM | 119 | CB | ASN | A | 21 | 40.310 | 69.512 | 84.371 | 1.00 | 23.81 |
| ATOM | 120 | CG | ASN | A | 21 | 39.601 | 69.311 | 85.697 | 1.00 | 26.97 |
| ATOM | 121 | OD1 | ASN | A | 21 | 38.392 | 69.175 | 85.836 | 1.00 | 26.36 |
| ATOM | 122 | ND2 | ASN | A | 21 | 40.403 | 69.303 | 86.744 | 1.00 | 32.00 |
| ATOM | 123 | N | SER | A | 22 | 41.378 | 68.486 | 81.450 | 1.00 | 23.72 |
| ATOM | 124 | CA | SER | A | 22 | 41.592 | 68.804 | 80.008 | 1.00 | 25.53 |
| ATOM | 125 | C | SER | A | 22 | 40.992 | 67.752 | 79.068 | 1.00 | 25.77 |
| ATOM | 126 | O | SER | A | 22 | 40.524 | 68.007 | 77.966 | 1.00 | 27.65 |
| ATOM | 127 | CB | SER | A | 22 | 43.079 | 68.868 | 79.699 | 1.00 | 23.34 |
| ATOM | 128 | OG | SER | A | 22 | 43.719 | 67.716 | 80.303 | 1.00 | 33.30 |
| ATOM | 129 | N | GLU | A | 23 | 40.957 | 66.529 | 79.624 | 1.00 | 22.35 |
| ATOM | 130 | CA | GLU | A | 23 | 40.320 | 65.466 | 78.899 | 1.00 | 21.87 |
| ATOM | 131 | C | GLU | A | 23 | 38.811 | 65.375 | 78.974 | 1.00 | 23.18 |
| ATOM | 132 | O | GLU | A | 23 | 38.197 | 64.451 | 78.471 | 1.00 | 25.83 |
| ATOM | 133 | CB | GLU | A | 23 | 40.923 | 64.165 | 79.337 | 1.00 | 22.13 |
| ATOM | 134 | CG | GLU | A | 23 | 42.451 | 64.215 | 79.214 | 1.00 | 26.78 |
| ATOM | 135 | CD | GLU | A | 23 | 43.021 | 62.908 | 79.718 | 1.00 | 30.40 |
| ATOM | 136 | OE1 | GLU | A | 23 | 42.946 | 62.648 | 80.900 | 1.00 | 31.10 |
| ATOM | 137 | OE2 | GLU | A | 23 | 43.544 | 62.118 | 78.957 | 1.00 | 32.35 |
| ATOM | 138 | N | ALA | A | 24 | 38.196 | 66.359 | 79.610 | 1.00 | 21.49 |
| ATOM | 139 | CA | ALA | A | 24 | 36.751 | 66.165 | 79.738 | 1.00 | 22.48 |
| ATOM | 140 | C | ALA | A | 24 | 35.973 | 66.420 | 78.438 | 1.00 | 22.81 |
| ATOM | 141 | O | ALA | A | 24 | 36.325 | 67.333 | 77.704 | 1.00 | 23.36 |
| ATOM | 142 | CB | ALA | A | 24 | 36.188 | 67.183 | 80.734 | 1.00 | 21.43 |
| ATOM | 143 | N | ILE | A | 25 | 34.859 | 65.694 | 78.228 | 1.00 | 23.46 |
| ATOM | 144 | CA | ILE | A | 25 | 33.845 | 66.149 | 77.243 | 1.00 | 23.60 |
| ATOM | 145 | C | ILE | A | 25 | 33.312 | 67.535 | 77.530 | 1.00 | 24.71 |
| ATOM | 146 | O | ILE | A | 25 | 32.788 | 67.809 | 78.603 | 1.00 | 25.03 |
| ATOM | 147 | CB | ILE | A | 25 | 32.684 | 65.160 | 77.096 | 1.00 | 20.26 |
| ATOM | 148 | CG1 | ILE | A | 25 | 33.237 | 63.749 | 76.838 | 1.00 | 23.14 |
| ATOM | 149 | CG2 | ILE | A | 25 | 31.739 | 65.555 | 75.954 | 1.00 | 21.26 |
| ATOM | 150 | CD1 | ILE | A | 25 | 34.298 | 63.551 | 75.722 | 1.00 | 16.94 |
| ATOM | 151 | N | ASN | A | 26 | 33.485 | 68.431 | 76.562 | 1.00 | 22.50 |
| ATOM | 152 | CA | ASN | A | 26 | 32.797 | 69.706 | 76.751 | 1.00 | 22.04 |
| ATOM | 153 | C | ASN | A | 26 | 31.295 | 69.680 | 76.533 | 1.00 | 22.52 |
| ATOM | 154 | O | ASN | A | 26 | 30.731 | 70.042 | 75.509 | 1.00 | 22.34 |
| ATOM | 155 | CB | ASN | A | 26 | 33.474 | 70.744 | 75.900 | 1.00 | 20.15 |
| ATOM | 156 | CG | ASN | A | 26 | 32.982 | 72.133 | 76.217 | 1.00 | 24.94 |
| ATOM | 157 | OD1 | ASN | A | 26 | 31.923 | 72.459 | 76.732 | 1.00 | 29.46 |
| ATOM | 158 | ND2 | ASN | A | 26 | 33.827 | 73.032 | 75.809 | 1.00 | 25.76 |
| ATOM | 159 | N | SER | A | 27 | 30.627 | 69.289 | 77.622 | 1.00 | 19.77 |
| ATOM | 160 | CA | SER | A | 27 | 29.166 | 69.168 | 77.549 | 1.00 | 18.88 |
| ATOM | 161 | C | SER | A | 27 | 28.412 | 70.423 | 77.177 | 1.00 | 18.74 |
| ATOM | 162 | O | SER | A | 27 | 27.390 | 70.393 | 76.517 | 1.00 | 21.73 |

【図 1 3】

| | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-------|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 163 | CB | SER A | 27 | 28.606 | 68.619 | 78.870 | 1.00 | 19.35 |
| ATOM | 164 | OG | SER A | 27 | 28.967 | 69.518 | 79.940 | 1.00 | 19.36 |
| ATOM | 165 | N | LEU A | 28 | 28.961 | 71.564 | 77.588 | 1.00 | 18.08 |
| ATOM | 166 | CA | LEU A | 28 | 28.271 | 72.815 | 77.262 | 1.00 | 20.15 |
| ATOM | 167 | C | LEU A | 28 | 28.283 | 73.062 | 75.761 | 1.00 | 23.12 |
| ATOM | 168 | O | LEU A | 28 | 27.303 | 73.485 | 75.165 | 1.00 | 22.25 |
| ATOM | 169 | CB | LEU A | 28 | 28.990 | 74.042 | 77.798 | 1.00 | 17.00 |
| ATOM | 170 | CG | LEU A | 28 | 28.159 | 75.188 | 78.376 | 1.00 | 18.01 |
| ATOM | 171 | CD1 | LEU A | 28 | 26.847 | 75.547 | 77.733 | 1.00 | 14.28 |
| ATOM | 172 | CD2 | LEU A | 28 | 29.053 | 76.394 | 78.592 | 1.00 | 16.45 |
| ATOM | 173 | N | ALA A | 29 | 29.478 | 72.767 | 75.193 | 1.00 | 23.87 |
| ATOM | 174 | CA | ALA A | 29 | 29.598 | 72.827 | 73.707 | 1.00 | 22.62 |
| ATOM | 175 | C | ALA A | 29 | 28.773 | 71.847 | 72.837 | 1.00 | 20.86 |
| ATOM | 176 | O | ALA A | 29 | 28.192 | 72.239 | 71.830 | 1.00 | 25.89 |
| ATOM | 177 | CB | ALA A | 29 | 31.065 | 72.692 | 73.326 | 1.00 | 20.24 |
| ATOM | 178 | N | LEU A | 30 | 28.733 | 70.580 | 73.267 | 1.00 | 15.78 |
| ATOM | 179 | CA | LEU A | 30 | 28.079 | 69.497 | 72.519 | 1.00 | 18.05 |
| ATOM | 180 | C | LEU A | 30 | 26.557 | 69.416 | 72.559 | 1.00 | 22.38 |
| ATOM | 181 | O | LEU A | 30 | 25.845 | 69.251 | 71.566 | 1.00 | 23.63 |
| ATOM | 182 | CB | LEU A | 30 | 28.732 | 68.194 | 72.977 | 1.00 | 16.47 |
| ATOM | 183 | CG | LEU A | 30 | 28.234 | 66.887 | 72.360 | 1.00 | 17.59 |
| ATOM | 184 | CD1 | LEU A | 30 | 28.812 | 65.706 | 73.120 | 1.00 | 12.95 |
| ATOM | 185 | CD2 | LEU A | 30 | 28.456 | 66.775 | 70.850 | 1.00 | 13.89 |
| ATOM | 186 | N | LEU A | 31 | 26.075 | 69.533 | 73.812 | 1.00 | 22.39 |
| ATOM | 187 | CA | LEU A | 31 | 24.633 | 69.430 | 74.049 | 1.00 | 18.84 |
| ATOM | 188 | C | LEU A | 31 | 23.817 | 70.624 | 73.538 | 1.00 | 16.30 |
| ATOM | 189 | O | LEU A | 31 | 24.260 | 71.763 | 73.576 | 1.00 | 19.93 |
| ATOM | 190 | CB | LEU A | 31 | 24.381 | 69.199 | 75.556 | 1.00 | 16.94 |
| ATOM | 191 | CG | LEU A | 31 | 24.923 | 67.873 | 76.095 | 1.00 | 17.95 |
| ATOM | 192 | CD1 | LEU A | 31 | 24.177 | 66.669 | 75.553 | 1.00 | 11.60 |
| ATOM | 193 | CD2 | LEU A | 31 | 24.823 | 67.878 | 77.628 | 1.00 | 18.77 |
| ATOM | 194 | N | PRO A | 32 | 22.581 | 70.333 | 73.105 | 1.00 | 14.80 |
| ATOM | 195 | CA | PRO A | 32 | 21.589 | 71.404 | 72.910 | 1.00 | 18.31 |
| ATOM | 196 | C | PRO A | 32 | 21.228 | 72.028 | 74.278 | 1.00 | 22.24 |
| ATOM | 197 | O | PRO A | 32 | 21.453 | 71.442 | 75.327 | 1.00 | 22.27 |
| ATOM | 198 | CB | PRO A | 32 | 20.402 | 70.621 | 72.348 | 1.00 | 15.94 |
| ATOM | 199 | CG | PRO A | 32 | 20.545 | 69.184 | 72.847 | 1.00 | 16.93 |
| ATOM | 200 | CD | PRO A | 32 | 22.038 | 68.972 | 72.954 | 1.00 | 15.56 |
| ATOM | 201 | N | PRO A | 33 | 20.657 | 73.249 | 74.287 | 1.00 | 23.41 |
| ATOM | 202 | CA | PRO A | 33 | 20.190 | 73.780 | 75.586 | 1.00 | 20.34 |
| ATOM | 203 | C | PRO A | 33 | 19.059 | 72.945 | 76.084 | 1.00 | 19.93 |
| ATOM | 204 | O | PRO A | 33 | 18.409 | 72.292 | 75.285 | 1.00 | 18.67 |
| ATOM | 205 | CB | PRO A | 33 | 19.659 | 75.158 | 75.224 | 1.00 | 18.52 |
| ATOM | 206 | CG | PRO A | 33 | 20.267 | 75.499 | 73.877 | 1.00 | 21.71 |
| ATOM | 207 | CD | PRO A | 33 | 20.406 | 74.146 | 73.177 | 1.00 | 21.12 |
| ATOM | 208 | N | PRO A | 34 | 18.785 | 72.950 | 77.411 | 1.00 | 19.36 |
| ATOM | 209 | CA | PRO A | 34 | 17.645 | 72.138 | 77.863 | 1.00 | 13.70 |
| ATOM | 210 | C | PRO A | 34 | 16.348 | 72.759 | 77.351 | 1.00 | 11.77 |
| ATOM | 211 | O | PRO A | 34 | 16.280 | 73.937 | 77.090 | 1.00 | 14.58 |
| ATOM | 212 | CB | PRO A | 34 | 17.760 | 72.358 | 79.389 | 1.00 | 13.66 |
| ATOM | 213 | CG | PRO A | 34 | 18.471 | 73.698 | 79.571 | 1.00 | 14.81 |
| ATOM | 214 | CD | PRO A | 34 | 19.499 | 73.679 | 78.464 | 1.00 | 16.49 |
| ATOM | 215 | N | PRO A | 35 | 15.257 | 72.007 | 77.284 | 1.00 | 12.52 |
| ATOM | 216 | CA | PRO A | 35 | 14.011 | 72.710 | 76.973 | 1.00 | 13.71 |

【図 1 4】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 217 | C | PRO | A | 35 | 13.665 | 73.842 | 77.945 | 1.00 | 20.26 |
| ATOM | 218 | O | PRO | A | 35 | 13.728 | 73.715 | 79.159 | 1.00 | 20.52 |
| ATOM | 219 | CB | PRO | A | 35 | 12.997 | 71.579 | 76.991 | 1.00 | 11.74 |
| ATOM | 220 | CG | PRO | A | 35 | 13.723 | 70.243 | 77.051 | 1.00 | 12.04 |
| ATOM | 221 | CD | PRO | A | 35 | 15.140 | 70.581 | 77.482 | 1.00 | 11.57 |
| ATOM | 222 | N | ALA | A | 36 | 13.311 | 74.962 | 77.356 | 1.00 | 19.25 |
| ATOM | 223 | CA | ALA | A | 36 | 12.919 | 76.136 | 78.122 | 1.00 | 18.78 |
| ATOM | 224 | C | ALA | A | 36 | 11.457 | 76.120 | 78.497 | 1.00 | 18.25 |
| ATOM | 225 | O | ALA | A | 36 | 10.582 | 75.579 | 77.847 | 1.00 | 18.88 |
| ATOM | 226 | CB | ALA | A | 36 | 13.152 | 77.414 | 77.304 | 1.00 | 17.95 |
| ATOM | 227 | N | VAL | A | 37 | 11.182 | 76.753 | 79.609 | 1.00 | 18.03 |
| ATOM | 228 | CA | VAL | A | 37 | 9.803 | 77.005 | 79.965 | 1.00 | 16.78 |
| ATOM | 229 | C | VAL | A | 37 | 9.135 | 77.993 | 78.998 | 1.00 | 17.18 |
| ATOM | 230 | O | VAL | A | 37 | 9.640 | 79.048 | 78.650 | 1.00 | 19.89 |
| ATOM | 231 | CB | VAL | A | 37 | 9.740 | 77.500 | 81.436 | 1.00 | 18.33 |
| ATOM | 232 | CG1 | VAL | A | 37 | 10.381 | 76.501 | 82.418 | 1.00 | 13.83 |
| ATOM | 233 | CG2 | VAL | A | 37 | 8.300 | 77.825 | 81.832 | 1.00 | 14.21 |
| ATOM | 234 | N | GLY | A | 38 | 7.952 | 77.616 | 78.561 | 1.00 | 18.34 |
| ATOM | 235 | CA | GLY | A | 38 | 7.422 | 78.249 | 77.343 | 1.00 | 22.06 |
| ATOM | 236 | C | GLY | A | 38 | 7.538 | 77.398 | 76.043 | 1.00 | 21.25 |
| ATOM | 237 | O | GLY | A | 38 | 6.851 | 77.623 | 75.068 | 1.00 | 22.09 |
| ATOM | 238 | N | SER | A | 39 | 8.422 | 76.401 | 76.060 | 1.00 | 21.73 |
| ATOM | 239 | CA | SER | A | 39 | 8.520 | 75.487 | 74.905 | 1.00 | 20.30 |
| ATOM | 240 | C | SER | A | 39 | 7.604 | 74.277 | 74.964 | 1.00 | 21.10 |
| ATOM | 241 | O | SER | A | 39 | 7.217 | 73.736 | 76.002 | 1.00 | 19.55 |
| ATOM | 242 | CB | SER | A | 39 | 9.946 | 74.998 | 74.748 | 1.00 | 15.45 |
| ATOM | 243 | OG | SER | A | 39 | 10.197 | 73.967 | 75.704 | 1.00 | 15.38 |
| ATOM | 244 | N | ILE | A | 40 | 7.287 | 73.796 | 73.772 | 1.00 | 17.17 |
| ATOM | 245 | CA | ILE | A | 40 | 6.618 | 72.485 | 73.702 | 1.00 | 14.71 |
| ATOM | 246 | C | ILE | A | 40 | 7.475 | 71.311 | 74.225 | 1.00 | 10.81 |
| ATOM | 247 | O | ILE | A | 40 | 6.998 | 70.315 | 74.782 | 1.00 | 15.23 |
| ATOM | 248 | CB | ILE | A | 40 | 6.102 | 72.235 | 72.219 | 1.00 | 15.78 |
| ATOM | 249 | CG1 | ILE | A | 40 | 5.162 | 73.368 | 71.791 | 1.00 | 15.41 |
| ATOM | 250 | CG2 | ILE | A | 40 | 5.406 | 70.863 | 72.091 | 1.00 | 14.54 |
| ATOM | 251 | CD1 | ILE | A | 40 | 4.812 | 73.332 | 70.307 | 1.00 | 18.26 |
| ATOM | 252 | N | ALA | A | 41 | 8.790 | 71.443 | 74.040 | 1.00 | 10.69 |
| ATOM | 253 | CA | ALA | A | 41 | 9.633 | 70.373 | 74.530 | 1.00 | 13.79 |
| ATOM | 254 | C | ALA | A | 41 | 9.566 | 70.300 | 76.091 | 1.00 | 15.36 |
| ATOM | 255 | O | ALA | A | 41 | 9.369 | 69.245 | 76.683 | 1.00 | 20.02 |
| ATOM | 256 | CB | ALA | A | 41 | 11.046 | 70.610 | 74.065 | 1.00 | 11.61 |
| ATOM | 257 | N | PHE | A | 42 | 9.547 | 71.495 | 76.702 | 1.00 | 16.94 |
| ATOM | 258 | CA | PHE | A | 42 | 9.200 | 71.480 | 78.151 | 1.00 | 15.75 |
| ATOM | 259 | C | PHE | A | 42 | 7.818 | 70.970 | 78.533 | 1.00 | 16.07 |
| ATOM | 260 | O | PHE | A | 42 | 7.652 | 70.182 | 79.448 | 1.00 | 19.72 |
| ATOM | 261 | CB | PHE | A | 42 | 9.513 | 72.819 | 78.819 | 1.00 | 17.93 |
| ATOM | 262 | CG | PHE | A | 42 | 9.380 | 72.700 | 80.338 | 1.00 | 20.96 |
| ATOM | 263 | CD1 | PHE | A | 42 | 10.297 | 71.904 | 81.056 | 1.00 | 19.46 |
| ATOM | 264 | CD2 | PHE | A | 42 | 8.324 | 73.370 | 80.997 | 1.00 | 20.99 |
| ATOM | 265 | CE1 | PHE | A | 42 | 10.148 | 71.763 | 82.450 | 1.00 | 17.30 |
| ATOM | 266 | CE2 | PHE | A | 42 | 8.190 | 73.248 | 82.402 | 1.00 | 19.79 |
| ATOM | 267 | CZ | PHE | A | 42 | 9.111 | 72.443 | 83.100 | 1.00 | 13.36 |
| ATOM | 268 | N | LEU | A | 43 | 6.790 | 71.375 | 77.765 | 1.00 | 19.00 |
| ATOM | 269 | CA | LEU | A | 43 | 5.507 | 70.643 | 77.917 | 1.00 | 19.22 |
| ATOM | 270 | C | LEU | A | 43 | 5.573 | 69.103 | 77.945 | 1.00 | 19.39 |

【图 1 5】

| | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-------|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 271 | O | LEU A | 43 | 4.957 | 68.410 | 78.749 | 1.00 | 17.69 |
| ATOM | 272 | CB | LEU A | 43 | 4.472 | 71.003 | 76.826 | 1.00 | 21.60 |
| ATOM | 273 | CG | LEU A | 43 | 3.213 | 71.850 | 77.034 | 1.00 | 24.67 |
| ATOM | 274 | CD1 | LEU A | 43 | 2.597 | 71.800 | 78.433 | 1.00 | 17.68 |
| ATOM | 275 | CD2 | LEU A | 43 | 2.172 | 71.549 | 75.953 | 1.00 | 21.72 |
| ATOM | 276 | N | ASN A | 44 | 6.392 | 68.588 | 77.023 | 1.00 | 19.47 |
| ATOM | 277 | CA | ASN A | 44 | 6.653 | 67.176 | 77.076 | 1.00 | 19.82 |
| ATOM | 278 | C | ASN A | 44 | 7.419 | 66.619 | 78.312 | 1.00 | 17.44 |
| ATOM | 279 | O | ASN A | 44 | 7.018 | 65.604 | 78.855 | 1.00 | 15.52 |
| ATOM | 280 | CB | ASN A | 44 | 7.259 | 66.847 | 75.747 | 1.00 | 19.07 |
| ATOM | 281 | CG | ASN A | 44 | 7.491 | 65.366 | 75.643 | 1.00 | 22.97 |
| ATOM | 282 | OD1 | ASN A | 44 | 8.605 | 64.906 | 75.468 | 1.00 | 30.35 |
| ATOM | 283 | ND2 | ASN A | 44 | 6.444 | 64.588 | 75.862 | 1.00 | 22.13 |
| ATOM | 284 | N | ASP A | 45 | 8.482 | 67.324 | 78.726 | 1.00 | 19.71 |
| ATOM | 285 | CA | ASP A | 45 | 9.175 | 67.050 | 80.020 | 1.00 | 19.87 |
| ATOM | 286 | C | ASP A | 45 | 8.192 | 66.977 | 81.213 | 1.00 | 19.30 |
| ATOM | 287 | O | ASP A | 45 | 8.103 | 66.009 | 81.956 | 1.00 | 21.00 |
| ATOM | 288 | CB | ASP A | 45 | 10.225 | 68.119 | 80.273 | 1.00 | 13.57 |
| ATOM | 289 | CG | ASP A | 45 | 11.563 | 67.769 | 79.706 | 1.00 | 12.64 |
| ATOM | 290 | OD1 | ASP A | 45 | 12.408 | 68.656 | 79.625 | 1.00 | 15.68 |
| ATOM | 291 | OD2 | ASP A | 45 | 11.823 | 66.611 | 79.414 | 1.00 | 14.57 |
| ATOM | 292 | N | GLN A | 46 | 7.347 | 68.007 | 81.299 | 1.00 | 19.62 |
| ATOM | 293 | CA | GLN A | 46 | 6.199 | 67.904 | 82.220 | 1.00 | 19.44 |
| ATOM | 294 | C | GLN A | 46 | 5.259 | 66.702 | 82.166 | 1.00 | 22.23 |
| ATOM | 295 | O | GLN A | 46 | 4.960 | 66.057 | 83.175 | 1.00 | 21.67 |
| ATOM | 296 | CB | GLN A | 46 | 5.353 | 69.153 | 82.218 | 1.00 | 16.35 |
| ATOM | 297 | CG | GLN A | 46 | 6.282 | 70.333 | 82.395 | 1.00 | 18.35 |
| ATOM | 298 | CD | GLN A | 46 | 5.398 | 71.519 | 82.591 | 1.00 | 26.07 |
| ATOM | 299 | OE1 | GLN A | 46 | 5.334 | 72.143 | 83.629 | 1.00 | 31.83 |
| ATOM | 300 | NE2 | GLN A | 46 | 4.622 | 71.823 | 81.591 | 1.00 | 22.82 |
| ATOM | 301 | N | ALA A | 47 | 4.838 | 66.364 | 80.935 | 1.00 | 19.12 |
| ATOM | 302 | CA | ALA A | 47 | 3.979 | 65.187 | 80.813 | 1.00 | 17.83 |
| ATOM | 303 | C | ALA A | 47 | 4.661 | 63.871 | 81.172 | 1.00 | 15.90 |
| ATOM | 304 | O | ALA A | 47 | 4.065 | 62.940 | 81.701 | 1.00 | 18.55 |
| ATOM | 305 | CB | ALA A | 47 | 3.441 | 65.066 | 79.367 | 1.00 | 17.11 |
| ATOM | 306 | N | MET A | 48 | 5.970 | 63.818 | 80.841 | 1.00 | 18.16 |
| ATOM | 307 | CA | MET A | 48 | 6.799 | 62.644 | 81.235 | 1.00 | 19.52 |
| ATOM | 308 | C | MET A | 48 | 7.012 | 62.460 | 82.765 | 1.00 | 21.38 |
| ATOM | 309 | O | MET A | 48 | 6.996 | 61.358 | 83.316 | 1.00 | 20.83 |
| ATOM | 310 | CB | MET A | 48 | 8.173 | 62.667 | 80.539 | 1.00 | 21.42 |
| ATOM | 311 | CG | MET A | 48 | 8.150 | 62.603 | 78.984 | 1.00 | 29.81 |
| ATOM | 312 | SD | MET A | 48 | 7.330 | 61.126 | 78.308 | 1.00 | 36.20 |
| ATOM | 313 | CE | MET A | 48 | 5.582 | 61.633 | 78.280 | 1.00 | 33.60 |
| ATOM | 314 | N | TYR A | 49 | 7.139 | 63.655 | 83.414 | 1.00 | 21.32 |
| ATOM | 315 | CA | TYR A | 49 | 7.066 | 63.807 | 84.885 | 1.00 | 21.30 |
| ATOM | 316 | C | TYR A | 49 | 5.773 | 63.244 | 85.515 | 1.00 | 22.58 |
| ATOM | 317 | O | TYR A | 49 | 5.797 | 62.383 | 86.390 | 1.00 | 24.04 |
| ATOM | 318 | CB | TYR A | 49 | 7.304 | 65.282 | 85.217 | 1.00 | 20.61 |
| ATOM | 319 | CG | TYR A | 49 | 7.034 | 65.494 | 86.692 | 1.00 | 23.57 |
| ATOM | 320 | CD1 | TYR A | 49 | 5.755 | 65.931 | 87.109 | 1.00 | 23.57 |
| ATOM | 321 | CD2 | TYR A | 49 | 8.080 | 65.194 | 87.574 | 1.00 | 21.83 |
| ATOM | 322 | CE1 | TYR A | 49 | 5.524 | 66.097 | 88.481 | 1.00 | 26.09 |
| ATOM | 323 | CE2 | TYR A | 49 | 7.844 | 65.349 | 88.943 | 1.00 | 23.18 |
| ATOM | 324 | CZ | TYR A | 49 | 6.591 | 65.842 | 89.377 | 1.00 | 26.31 |

【図 1 6】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 325 | OH | TYR | A | 49 | 6.444 | 66.124 | 90.726 | 1.00 | 29.46 |
| ATOM | 326 | N | GLU | A | 50 | 4.639 | 63.731 | 84.994 | 1.00 | 22.09 |
| ATOM | 327 | CA | GLU | A | 50 | 3.336 | 63.234 | 85.472 | 1.00 | 21.48 |
| ATOM | 328 | C | GLU | A | 50 | 3.052 | 61.776 | 85.230 | 1.00 | 23.20 |
| ATOM | 329 | O | GLU | A | 50 | 2.548 | 61.050 | 86.081 | 1.00 | 24.23 |
| ATOM | 330 | CB | GLU | A | 50 | 2.190 | 64.023 | 84.862 | 1.00 | 21.88 |
| ATOM | 331 | CG | GLU | A | 50 | 2.304 | 65.537 | 84.986 | 1.00 | 21.13 |
| ATOM | 332 | CD | GLU | A | 50 | 2.054 | 65.976 | 86.417 | 1.00 | 25.41 |
| ATOM | 333 | OE1 | GLU | A | 50 | 1.887 | 65.138 | 87.287 | 1.00 | 24.65 |
| ATOM | 334 | OE2 | GLU | A | 50 | 2.004 | 67.162 | 86.679 | 1.00 | 25.05 |
| ATOM | 335 | N | GLN | A | 51 | 3.479 | 61.343 | 84.032 | 1.00 | 23.02 |
| ATOM | 336 | CA | GLN | A | 51 | 3.427 | 59.907 | 83.812 | 1.00 | 24.72 |
| ATOM | 337 | C | GLN | A | 51 | 4.275 | 59.006 | 84.728 | 1.00 | 26.23 |
| ATOM | 338 | O | GLN | A | 51 | 3.804 | 57.996 | 85.253 | 1.00 | 25.10 |
| ATOM | 339 | CB | GLN | A | 51 | 3.680 | 59.545 | 82.355 | 1.00 | 24.41 |
| ATOM | 340 | CG | GLN | A | 51 | 3.461 | 58.028 | 82.141 | 1.00 | 38.05 |
| ATOM | 341 | CD | GLN | A | 51 | 2.115 | 57.435 | 82.657 | 1.00 | 53.15 |
| ATOM | 342 | OE1 | GLN | A | 51 | 1.093 | 58.076 | 82.867 | 1.00 | 61.03 |
| ATOM | 343 | NE2 | GLN | A | 51 | 2.098 | 56.123 | 82.834 | 1.00 | 55.24 |
| ATOM | 344 | N | GLY | A | 52 | 5.556 | 59.414 | 84.922 | 1.00 | 26.76 |
| ATOM | 345 | CA | GLY | A | 52 | 6.400 | 58.689 | 85.876 | 1.00 | 26.91 |
| ATOM | 346 | C | GLY | A | 52 | 5.793 | 58.681 | 87.286 | 1.00 | 25.60 |
| ATOM | 347 | O | GLY | A | 52 | 5.666 | 57.699 | 87.997 | 1.00 | 24.37 |
| ATOM | 348 | N | ARG | A | 53 | 5.321 | 59.874 | 87.621 | 1.00 | 28.09 |
| ATOM | 349 | CA | ARG | A | 53 | 4.527 | 60.032 | 88.834 | 1.00 | 29.75 |
| ATOM | 350 | C | ARG | A | 53 | 3.384 | 59.049 | 89.067 | 1.00 | 32.01 |
| ATOM | 351 | O | ARG | A | 53 | 3.284 | 58.437 | 90.115 | 1.00 | 34.69 |
| ATOM | 352 | CB | ARG | A | 53 | 4.128 | 61.494 | 88.965 | 1.00 | 30.41 |
| ATOM | 353 | CG | ARG | A | 53 | 3.857 | 61.919 | 90.389 | 1.00 | 29.15 |
| ATOM | 354 | CD | ARG | A | 53 | 3.519 | 63.393 | 90.461 | 1.00 | 29.38 |
| ATOM | 355 | NE | ARG | A | 53 | 2.385 | 63.740 | 89.609 | 1.00 | 31.35 |
| ATOM | 356 | CZ | ARG | A | 53 | 1.088 | 63.593 | 89.886 | 1.00 | 32.29 |
| ATOM | 357 | NH1 | ARG | A | 53 | 0.187 | 64.144 | 89.125 | 1.00 | 32.06 |
| ATOM | 358 | NH2 | ARG | A | 53 | 0.661 | 62.938 | 90.931 | 1.00 | 32.66 |
| ATOM | 359 | N | LEU | A | 54 | 2.575 | 58.839 | 88.033 | 1.00 | 32.47 |
| ATOM | 360 | CA | LEU | A | 54 | 1.588 | 57.735 | 88.076 | 1.00 | 31.67 |
| ATOM | 361 | C | LEU | A | 54 | 2.114 | 56.273 | 88.119 | 1.00 | 33.30 |
| ATOM | 362 | O | LEU | A | 54 | 1.452 | 55.329 | 88.568 | 1.00 | 35.90 |
| ATOM | 363 | CB | LEU | A | 54 | 0.603 | 57.880 | 86.901 | 1.00 | 33.52 |
| ATOM | 364 | CG | LEU | A | 54 | -0.599 | 58.822 | 87.055 | 1.00 | 32.85 |
| ATOM | 365 | CD1 | LEU | A | 54 | -1.298 | 59.020 | 85.709 | 1.00 | 30.53 |
| ATOM | 366 | CD2 | LEU | A | 54 | -0.286 | 60.130 | 87.777 | 1.00 | 36.56 |
| ATOM | 367 | N | LEU | A | 55 | 3.374 | 56.117 | 87.657 | 1.00 | 31.95 |
| ATOM | 368 | CA | LEU | A | 55 | 4.016 | 54.784 | 87.735 | 1.00 | 32.70 |
| ATOM | 369 | C | LEU | A | 55 | 4.577 | 54.392 | 89.091 | 1.00 | 33.98 |
| ATOM | 370 | O | LEU | A | 55 | 4.842 | 53.224 | 89.386 | 1.00 | 32.73 |
| ATOM | 371 | CB | LEU | A | 55 | 5.194 | 54.646 | 86.790 | 1.00 | 31.04 |
| ATOM | 372 | CG | LEU | A | 55 | 4.832 | 54.514 | 85.343 | 1.00 | 28.60 |
| ATOM | 373 | CD1 | LEU | A | 55 | 3.960 | 53.287 | 85.101 | 1.00 | 27.88 |
| ATOM | 374 | CD2 | LEU | A | 55 | 6.118 | 54.471 | 84.539 | 1.00 | 28.33 |
| ATOM | 375 | N | ARG | A | 56 | 4.732 | 55.458 | 89.911 | 1.00 | 36.20 |
| ATOM | 376 | CA | ARG | A | 56 | 5.257 | 55.308 | 91.281 | 1.00 | 37.04 |
| ATOM | 377 | C | ARG | A | 56 | 4.616 | 54.240 | 92.164 | 1.00 | 40.28 |
| ATOM | 378 | O | ARG | A | 56 | 5.260 | 53.518 | 92.907 | 1.00 | 41.22 |

【図 1 7】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 379 | CB | ARG | A | 56 | 5.249 | 56.643 | 91.993 | 1.00 | 32.58 |
| ATOM | 380 | CG | ARG | A | 56 | 6.368 | 57.502 | 91.476 | 1.00 | 22.04 |
| ATOM | 381 | CD | ARG | A | 56 | 6.142 | 58.874 | 92.049 | 1.00 | 21.74 |
| ATOM | 382 | NE | ARG | A | 56 | 7.073 | 59.804 | 91.447 | 1.00 | 23.56 |
| ATOM | 383 | CZ | ARG | A | 56 | 7.062 | 61.074 | 91.750 | 1.00 | 25.56 |
| ATOM | 384 | NH1 | ARG | A | 56 | 6.401 | 61.444 | 92.790 | 1.00 | 30.94 |
| ATOM | 385 | NH2 | ARG | A | 56 | 7.688 | 61.979 | 91.035 | 1.00 | 22.33 |
| ATOM | 386 | N | ASN | A | 57 | 3.306 | 54.120 | 91.997 | 1.00 | 44.42 |
| ATOM | 387 | CA | ASN | A | 57 | 2.602 | 53.027 | 92.680 | 1.00 | 48.62 |
| ATOM | 388 | C | ASN | A | 57 | 2.786 | 51.585 | 92.169 | 1.00 | 47.46 |
| ATOM | 389 | O | ASN | A | 57 | 2.316 | 50.630 | 92.759 | 1.00 | 51.15 |
| ATOM | 390 | CB | ASN | A | 57 | 1.124 | 53.435 | 92.726 | 1.00 | 59.30 |
| ATOM | 391 | CG | ASN | A | 57 | 0.389 | 53.137 | 94.049 | 1.00 | 68.98 |
| ATOM | 392 | OD1 | ASN | A | 57 | -0.829 | 53.335 | 94.164 | 1.00 | 75.09 |
| ATOM | 393 | ND2 | ASN | A | 57 | 1.140 | 52.692 | 95.058 | 1.00 | 71.68 |
| ATOM | 394 | N | THR | A | 58 | 3.461 | 51.442 | 91.036 | 1.00 | 42.68 |
| ATOM | 395 | CA | THR | A | 58 | 3.555 | 50.086 | 90.475 | 1.00 | 36.64 |
| ATOM | 396 | C | THR | A | 58 | 4.821 | 49.318 | 90.871 | 1.00 | 33.64 |
| ATOM | 397 | O | THR | A | 58 | 5.721 | 49.876 | 91.477 | 1.00 | 31.69 |
| ATOM | 398 | CB | THR | A | 58 | 3.492 | 50.189 | 88.948 | 1.00 | 36.81 |
| ATOM | 399 | OG1 | THR | A | 58 | 4.774 | 50.576 | 88.447 | 1.00 | 37.64 |
| ATOM | 400 | CG2 | THR | A | 58 | 2.432 | 51.203 | 88.507 | 1.00 | 35.36 |
| ATOM | 401 | N | GLU | A | 59 | 4.937 | 48.068 | 90.409 | 1.00 | 33.08 |
| ATOM | 402 | CA | GLU | A | 59 | 6.238 | 47.410 | 90.581 | 1.00 | 34.80 |
| ATOM | 403 | C | GLU | A | 59 | 7.487 | 48.104 | 89.944 | 1.00 | 33.45 |
| ATOM | 404 | O | GLU | A | 59 | 8.607 | 48.153 | 90.463 | 1.00 | 34.28 |
| ATOM | 405 | CB | GLU | A | 59 | 6.067 | 45.933 | 90.191 | 1.00 | 43.43 |
| ATOM | 406 | CG | GLU | A | 59 | 7.242 | 45.007 | 90.614 | 1.00 | 59.74 |
| ATOM | 407 | CD | GLU | A | 59 | 7.519 | 44.933 | 92.159 | 1.00 | 69.61 |
| ATOM | 408 | OE1 | GLU | A | 59 | 6.582 | 45.064 | 92.960 | 1.00 | 74.78 |
| ATOM | 409 | OE2 | GLU | A | 59 | 8.686 | 44.751 | 92.589 | 1.00 | 74.97 |
| ATOM | 410 | N | ARG | A | 60 | 7.229 | 48.734 | 88.768 | 1.00 | 27.61 |
| ATOM | 411 | CA | ARG | A | 60 | 8.251 | 49.599 | 88.158 | 1.00 | 25.02 |
| ATOM | 412 | C | ARG | A | 60 | 8.614 | 50.851 | 88.958 | 1.00 | 22.94 |
| ATOM | 413 | O | ARG | A | 60 | 9.772 | 51.257 | 89.002 | 1.00 | 24.63 |
| ATOM | 414 | CB | ARG | A | 60 | 7.874 | 49.966 | 86.690 | 1.00 | 26.16 |
| ATOM | 415 | CG | ARG | A | 60 | 8.877 | 50.860 | 85.900 | 1.00 | 24.47 |
| ATOM | 416 | CD | ARG | A | 60 | 10.268 | 50.249 | 85.758 | 1.00 | 23.96 |
| ATOM | 417 | NE | ARG | A | 60 | 11.285 | 51.161 | 85.217 | 1.00 | 25.64 |
| ATOM | 418 | CZ | ARG | A | 60 | 12.214 | 51.778 | 85.945 | 1.00 | 24.77 |
| ATOM | 419 | NH1 | ARG | A | 60 | 12.159 | 51.805 | 87.261 | 1.00 | 24.78 |
| ATOM | 420 | NH2 | ARG | A | 60 | 13.227 | 52.294 | 85.325 | 1.00 | 19.79 |
| ATOM | 421 | N | GLY | A | 61 | 7.562 | 51.411 | 89.587 | 1.00 | 21.94 |
| ATOM | 422 | CA | GLY | A | 61 | 7.623 | 52.443 | 90.620 | 1.00 | 22.33 |
| ATOM | 423 | C | GLY | A | 61 | 8.468 | 52.051 | 91.824 | 1.00 | 24.44 |
| ATOM | 424 | O | GLY | A | 61 | 9.350 | 52.773 | 92.253 | 1.00 | 25.22 |
| ATOM | 425 | N | LYS | A | 62 | 8.248 | 50.821 | 92.307 | 1.00 | 26.95 |
| ATOM | 426 | CA | LYS | A | 62 | 9.102 | 50.251 | 93.350 | 1.00 | 26.24 |
| ATOM | 427 | C | LYS | A | 62 | 10.590 | 50.158 | 93.045 | 1.00 | 24.89 |
| ATOM | 428 | O | LYS | A | 62 | 11.443 | 50.668 | 93.756 | 1.00 | 23.23 |
| ATOM | 429 | CB | LYS | A | 62 | 8.519 | 48.900 | 93.723 | 1.00 | 29.90 |
| ATOM | 430 | CG | LYS | A | 62 | 9.379 | 48.296 | 94.835 | 1.00 | 38.76 |
| ATOM | 431 | CD | LYS | A | 62 | 8.847 | 46.904 | 95.222 | 1.00 | 47.47 |
| ATOM | 432 | CE | LYS | A | 62 | 9.944 | 45.971 | 95.773 | 1.00 | 53.72 |

【図 1 8】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 433 | NZ | LYS | A | 62 | 10.167 | 44.857 | 94.832 | 1.00 | 60.22 |
| ATOM | 434 | N | LEU | A | 63 | 10.866 | 49.560 | 91.882 | 1.00 | 24.67 |
| ATOM | 435 | CA | LEU | A | 63 | 12.239 | 49.634 | 91.346 | 1.00 | 23.65 |
| ATOM | 436 | C | LEU | A | 63 | 12.805 | 51.043 | 91.186 | 1.00 | 22.74 |
| ATOM | 437 | O | LEU | A | 63 | 13.927 | 51.359 | 91.517 | 1.00 | 25.19 |
| ATOM | 438 | CB | LEU | A | 63 | 12.232 | 48.973 | 89.981 | 1.00 | 27.11 |
| ATOM | 439 | CG | LEU | A | 63 | 13.477 | 48.298 | 89.403 | 1.00 | 31.83 |
| ATOM | 440 | CD1 | LEU | A | 63 | 14.808 | 48.658 | 90.077 | 1.00 | 33.84 |
| ATOM | 441 | CD2 | LEU | A | 63 | 13.440 | 48.410 | 87.874 | 1.00 | 26.95 |
| ATOM | 442 | N | ALA | A | 64 | 11.979 | 51.940 | 90.642 | 1.00 | 21.62 |
| ATOM | 443 | CA | ALA | A | 64 | 12.492 | 53.308 | 90.539 | 1.00 | 20.51 |
| ATOM | 444 | C | ALA | A | 64 | 12.862 | 53.971 | 91.863 | 1.00 | 21.79 |
| ATOM | 445 | O | ALA | A | 64 | 13.890 | 54.636 | 91.984 | 1.00 | 21.21 |
| ATOM | 446 | CB | ALA | A | 64 | 11.456 | 54.196 | 89.862 | 1.00 | 19.01 |
| ATOM | 447 | N | ALA | A | 65 | 11.984 | 53.747 | 92.870 | 1.00 | 23.25 |
| ATOM | 448 | CA | ALA | A | 65 | 12.374 | 54.212 | 94.235 | 1.00 | 24.88 |
| ATOM | 449 | C | ALA | A | 65 | 13.684 | 53.619 | 94.784 | 1.00 | 22.62 |
| ATOM | 450 | O | ALA | A | 65 | 14.551 | 54.328 | 95.268 | 1.00 | 22.95 |
| ATOM | 451 | CB | ALA | A | 65 | 11.249 | 54.013 | 95.265 | 1.00 | 25.38 |
| ATOM | 452 | N | GLU | A | 66 | 13.848 | 52.295 | 94.572 | 1.00 | 23.38 |
| ATOM | 453 | CA | GLU | A | 66 | 15.116 | 51.632 | 94.878 | 1.00 | 23.41 |
| ATOM | 454 | C | GLU | A | 66 | 16.332 | 52.188 | 94.152 | 1.00 | 26.06 |
| ATOM | 455 | O | GLU | A | 66 | 17.321 | 52.604 | 94.744 | 1.00 | 25.12 |
| ATOM | 456 | CB | GLU | A | 66 | 14.968 | 50.136 | 94.665 | 1.00 | 25.85 |
| ATOM | 457 | CG | GLU | A | 66 | 13.818 | 49.616 | 95.533 | 1.00 | 31.94 |
| ATOM | 458 | CD | GLU | A | 66 | 13.546 | 48.142 | 95.293 | 1.00 | 37.59 |
| ATOM | 459 | OE1 | GLU | A | 66 | 13.147 | 47.430 | 96.220 | 1.00 | 40.33 |
| ATOM | 460 | OE2 | GLU | A | 66 | 13.721 | 47.673 | 94.176 | 1.00 | 40.79 |
| ATOM | 461 | N | ASP | A | 67 | 16.204 | 52.276 | 92.817 | 1.00 | 24.01 |
| ATOM | 462 | CA | ASP | A | 67 | 17.222 | 52.928 | 91.986 | 1.00 | 19.72 |
| ATOM | 463 | C | ASP | A | 67 | 17.549 | 54.333 | 92.402 | 1.00 | 16.72 |
| ATOM | 464 | O | ASP | A | 67 | 18.694 | 54.767 | 92.414 | 1.00 | 18.91 |
| ATOM | 465 | CB | ASP | A | 67 | 16.787 | 52.944 | 90.495 | 1.00 | 21.68 |
| ATOM | 466 | CG | ASP | A | 67 | 16.824 | 51.580 | 89.801 | 1.00 | 25.22 |
| ATOM | 467 | OD1 | ASP | A | 67 | 17.340 | 50.629 | 90.370 | 1.00 | 23.32 |
| ATOM | 468 | OD2 | ASP | A | 67 | 16.349 | 51.434 | 88.666 | 1.00 | 26.83 |
| ATOM | 469 | N | ALA | A | 68 | 16.485 | 55.059 | 92.773 | 1.00 | 16.48 |
| ATOM | 470 | CA | ALA | A | 68 | 16.685 | 56.425 | 93.250 | 1.00 | 19.28 |
| ATOM | 471 | C | ALA | A | 68 | 17.489 | 56.510 | 94.569 | 1.00 | 20.86 |
| ATOM | 472 | O | ALA | A | 68 | 18.165 | 57.494 | 94.837 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 473 | CB | ALA | A | 68 | 15.330 | 57.134 | 93.419 | 1.00 | 19.81 |
| ATOM | 474 | N | ASN | A | 69 | 17.472 | 55.371 | 95.299 | 1.00 | 23.11 |
| ATOM | 475 | CA | ASN | A | 69 | 18.330 | 55.262 | 96.514 | 1.00 | 27.41 |
| ATOM | 476 | C | ASN | A | 69 | 19.816 | 55.042 | 96.273 | 1.00 | 29.49 |
| ATOM | 477 | O | ASN | A | 69 | 20.646 | 55.304 | 97.140 | 1.00 | 28.64 |
| ATOM | 478 | CB | ASN | A | 69 | 17.933 | 54.145 | 97.466 | 1.00 | 24.19 |
| ATOM | 479 | CG | ASN | A | 69 | 16.632 | 54.425 | 98.142 | 1.00 | 25.79 |
| ATOM | 480 | OD1 | ASN | A | 69 | 16.298 | 55.549 | 98.445 | 1.00 | 26.84 |
| ATOM | 481 | ND2 | ASN | A | 69 | 15.894 | 53.359 | 98.410 | 1.00 | 30.16 |
| ATOM | 482 | N | LEU | A | 70 | 20.104 | 54.574 | 95.034 | 1.00 | 25.30 |
| ATOM | 483 | CA | LEU | A | 70 | 21.514 | 54.442 | 94.627 | 1.00 | 23.20 |
| ATOM | 484 | C | LEU | A | 70 | 22.329 | 55.691 | 94.640 | 1.00 | 21.41 |
| ATOM | 485 | O | LEU | A | 70 | 22.013 | 56.696 | 94.028 | 1.00 | 23.50 |
| ATOM | 486 | CB | LEU | A | 70 | 21.672 | 53.890 | 93.225 | 1.00 | 22.19 |

【図 1 9】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 487 | CG | LEU | A | 70 | 21.078 | 52.512 | 93.095 | 1.00 | 22.16 |
| ATOM | 488 | CD1 | LEU | A | 70 | 21.830 | 51.459 | 93.896 | 1.00 | 20.70 |
| ATOM | 489 | CD2 | LEU | A | 70 | 21.016 | 52.154 | 91.624 | 1.00 | 23.47 |
| ATOM | 490 | N | SER | A | 71 | 23.450 | 55.563 | 95.304 | 1.00 | 21.73 |
| ATOM | 491 | CA | SER | A | 71 | 24.527 | 56.515 | 95.119 | 1.00 | 22.25 |
| ATOM | 492 | C | SER | A | 71 | 25.355 | 56.171 | 93.888 | 1.00 | 20.52 |
| ATOM | 493 | O | SER | A | 71 | 25.269 | 55.081 | 93.357 | 1.00 | 23.70 |
| ATOM | 494 | CB | SER | A | 71 | 25.453 | 56.521 | 96.349 | 1.00 | 22.74 |
| ATOM | 495 | OG | SER | A | 71 | 26.232 | 55.303 | 96.432 | 1.00 | 28.68 |
| ATOM | 496 | N | SER | A | 72 | 26.220 | 57.079 | 93.445 | 1.00 | 20.02 |
| ATOM | 497 | CA | SER | A | 72 | 27.096 | 56.747 | 92.294 | 1.00 | 20.88 |
| ATOM | 498 | C | SER | A | 72 | 27.860 | 55.479 | 92.410 | 1.00 | 22.52 |
| ATOM | 499 | O | SER | A | 72 | 27.979 | 54.663 | 91.518 | 1.00 | 21.65 |
| ATOM | 500 | CB | SER | A | 72 | 28.113 | 57.834 | 92.083 | 1.00 | 19.05 |
| ATOM | 501 | OG | SER | A | 72 | 27.352 | 58.966 | 91.735 | 1.00 | 22.00 |
| ATOM | 502 | N | GLY | A | 73 | 28.336 | 55.318 | 93.640 | 1.00 | 20.71 |
| ATOM | 503 | CA | GLY | A | 73 | 28.979 | 54.068 | 94.006 | 1.00 | 16.81 |
| ATOM | 504 | C | GLY | A | 73 | 28.146 | 52.783 | 93.939 | 1.00 | 15.97 |
| ATOM | 505 | O | GLY | A | 73 | 28.697 | 51.705 | 93.753 | 1.00 | 20.02 |
| ATOM | 506 | N | GLY | A | 74 | 26.818 | 52.915 | 94.046 | 1.00 | 16.07 |
| ATOM | 507 | CA | GLY | A | 74 | 26.090 | 51.649 | 93.967 | 1.00 | 18.17 |
| ATOM | 508 | C | GLY | A | 74 | 25.671 | 51.260 | 92.526 | 1.00 | 21.98 |
| ATOM | 509 | O | GLY | A | 74 | 25.202 | 50.164 | 92.238 | 1.00 | 21.28 |
| ATOM | 510 | N | VAL | A | 75 | 25.887 | 52.210 | 91.567 | 1.00 | 22.48 |
| ATOM | 511 | CA | VAL | A | 75 | 25.521 | 51.777 | 90.174 | 1.00 | 22.71 |
| ATOM | 512 | C | VAL | A | 75 | 26.174 | 50.493 | 89.628 | 1.00 | 18.50 |
| ATOM | 513 | O | VAL | A | 75 | 25.497 | 49.573 | 89.210 | 1.00 | 20.32 |
| ATOM | 514 | CB | VAL | A | 75 | 25.820 | 52.946 | 89.218 | 1.00 | 23.52 |
| ATOM | 515 | CG1 | VAL | A | 75 | 25.719 | 52.707 | 87.712 | 1.00 | 21.49 |
| ATOM | 516 | CG2 | VAL | A | 75 | 25.153 | 54.265 | 89.560 | 1.00 | 17.54 |
| ATOM | 517 | N | ALA | A | 76 | 27.517 | 50.394 | 89.738 | 1.00 | 21.05 |
| ATOM | 518 | CA | ALA | A | 76 | 28.149 | 49.125 | 89.372 | 1.00 | 20.51 |
| ATOM | 519 | C | ALA | A | 76 | 27.414 | 47.875 | 89.826 | 1.00 | 24.64 |
| ATOM | 520 | O | ALA | A | 76 | 27.033 | 47.028 | 89.015 | 1.00 | 24.90 |
| ATOM | 521 | CB | ALA | A | 76 | 29.612 | 49.071 | 89.810 | 1.00 | 19.14 |
| ATOM | 522 | N | ASN | A | 77 | 27.131 | 47.820 | 91.145 | 1.00 | 20.97 |
| ATOM | 523 | CA | ASN | A | 77 | 26.463 | 46.601 | 91.622 | 1.00 | 17.62 |
| ATOM | 524 | C | ASN | A | 77 | 25.019 | 46.464 | 91.205 | 1.00 | 16.57 |
| ATOM | 525 | O | ASN | A | 77 | 24.536 | 45.350 | 91.024 | 1.00 | 19.24 |
| ATOM | 526 | CB | ASN | A | 77 | 26.615 | 46.509 | 93.137 | 1.00 | 23.52 |
| ATOM | 527 | CG | ASN | A | 77 | 25.817 | 45.362 | 93.677 | 1.00 | 21.57 |
| ATOM | 528 | OD1 | ASN | A | 77 | 24.672 | 45.508 | 94.079 | 1.00 | 26.66 |
| ATOM | 529 | ND2 | ASN | A | 77 | 26.435 | 44.202 | 93.627 | 1.00 | 24.64 |
| ATOM | 530 | N | ALA | A | 78 | 24.377 | 47.638 | 91.017 | 1.00 | 17.23 |
| ATOM | 531 | CA | ALA | A | 78 | 23.060 | 47.710 | 90.339 | 1.00 | 18.62 |
| ATOM | 532 | C | ALA | A | 78 | 22.874 | 47.025 | 88.941 | 1.00 | 19.92 |
| ATOM | 533 | O | ALA | A | 78 | 21.767 | 46.705 | 88.517 | 1.00 | 21.04 |
| ATOM | 534 | CB | ALA | A | 78 | 22.636 | 49.160 | 90.208 | 1.00 | 13.62 |
| ATOM | 535 | N | PHE | A | 79 | 24.025 | 46.748 | 88.292 | 1.00 | 19.22 |
| ATOM | 536 | CA | PHE | A | 79 | 24.019 | 45.921 | 87.070 | 1.00 | 20.71 |
| ATOM | 537 | C | PHE | A | 79 | 24.117 | 44.420 | 87.238 | 1.00 | 23.30 |
| ATOM | 538 | O | PHE | A | 79 | 24.161 | 43.662 | 86.273 | 1.00 | 23.64 |
| ATOM | 539 | CB | PHE | A | 79 | 25.116 | 46.352 | 86.082 | 1.00 | 18.00 |
| ATOM | 540 | CG | PHE | A | 79 | 24.821 | 47.683 | 85.382 | 1.00 | 19.59 |

【図 2 0】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 541 | CD1 | PHE | A | 79 | 25.181 | 48.903 | 85.984 | 1.00 | 17.05 |
| ATOM | 542 | CD2 | PHE | A | 79 | 24.214 | 47.687 | 84.104 | 1.00 | 18.56 |
| ATOM | 543 | CE1 | PHE | A | 79 | 25.026 | 50.119 | 85.298 | 1.00 | 19.06 |
| ATOM | 544 | CE2 | PHE | A | 79 | 24.040 | 48.906 | 83.419 | 1.00 | 15.97 |
| ATOM | 545 | CZ | PHE | A | 79 | 24.500 | 50.104 | 83.989 | 1.00 | 17.87 |
| ATOM | 546 | N | SER | A | 80 | 24.150 | 43.947 | 88.488 | 1.00 | 19.74 |
| ATOM | 547 | CA | SER | A | 80 | 24.500 | 42.511 | 88.632 | 1.00 | 17.29 |
| ATOM | 548 | C | SER | A | 80 | 23.601 | 41.501 | 87.944 | 1.00 | 18.57 |
| ATOM | 549 | O | SER | A | 80 | 23.977 | 40.494 | 87.339 | 1.00 | 22.38 |
| ATOM | 550 | CB | SER | A | 80 | 24.608 | 42.106 | 90.125 | 1.00 | 15.17 |
| ATOM | 551 | OG | SER | A | 80 | 25.646 | 42.920 | 90.700 | 1.00 | 17.32 |
| ATOM | 552 | N | GLY | A | 81 | 22.309 | 41.852 | 88.041 | 1.00 | 19.68 |
| ATOM | 553 | CA | GLY | A | 81 | 21.271 | 41.005 | 87.413 | 1.00 | 22.50 |
| ATOM | 554 | C | GLY | A | 81 | 21.293 | 40.977 | 85.855 | 1.00 | 24.85 |
| ATOM | 555 | O | GLY | A | 81 | 21.318 | 39.939 | 85.211 | 1.00 | 23.46 |
| ATOM | 556 | N | ALA | A | 82 | 21.380 | 42.197 | 85.279 | 1.00 | 24.60 |
| ATOM | 557 | CA | ALA | A | 82 | 21.686 | 42.339 | 83.855 | 1.00 | 24.50 |
| ATOM | 558 | C | ALA | A | 82 | 22.985 | 41.643 | 83.417 | 1.00 | 25.22 |
| ATOM | 559 | O | ALA | A | 82 | 23.000 | 40.873 | 82.468 | 1.00 | 23.42 |
| ATOM | 560 | CB | ALA | A | 82 | 21.649 | 43.819 | 83.470 | 1.00 | 20.35 |
| ATOM | 561 | N | PHE | A | 83 | 24.050 | 41.874 | 84.197 | 1.00 | 23.76 |
| ATOM | 562 | CA | PHE | A | 83 | 25.319 | 41.242 | 83.894 | 1.00 | 21.76 |
| ATOM | 563 | C | PHE | A | 83 | 25.325 | 39.726 | 83.974 | 1.00 | 22.85 |
| ATOM | 564 | O | PHE | A | 83 | 26.090 | 39.052 | 83.322 | 1.00 | 25.72 |
| ATOM | 565 | CB | PHE | A | 83 | 26.349 | 41.867 | 84.792 | 1.00 | 20.01 |
| ATOM | 566 | CG | PHE | A | 83 | 27.770 | 41.527 | 84.394 | 1.00 | 20.95 |
| ATOM | 567 | CD1 | PHE | A | 83 | 28.486 | 40.587 | 85.152 | 1.00 | 16.94 |
| ATOM | 568 | CD2 | PHE | A | 83 | 28.391 | 42.208 | 83.307 | 1.00 | 23.09 |
| ATOM | 569 | CE1 | PHE | A | 83 | 29.841 | 40.355 | 84.843 | 1.00 | 18.79 |
| ATOM | 570 | CE2 | PHE | A | 83 | 29.751 | 41.991 | 83.001 | 1.00 | 20.95 |
| ATOM | 571 | CZ | PHE | A | 83 | 30.474 | 41.069 | 83.795 | 1.00 | 21.43 |
| ATOM | 572 | N | GLY | A | 84 | 24.409 | 39.187 | 84.768 | 1.00 | 22.31 |
| ATOM | 573 | CA | GLY | A | 84 | 24.478 | 37.740 | 84.865 | 1.00 | 24.39 |
| ATOM | 574 | C | GLY | A | 84 | 25.199 | 37.163 | 86.093 | 1.00 | 29.49 |
| ATOM | 575 | O | GLY | A | 84 | 25.158 | 35.963 | 86.362 | 1.00 | 32.27 |
| ATOM | 576 | N | SER | A | 85 | 25.873 | 38.058 | 86.843 | 1.00 | 30.33 |
| ATOM | 577 | CA | SER | A | 85 | 26.685 | 37.625 | 88.001 | 1.00 | 28.46 |
| ATOM | 578 | C | SER | A | 85 | 27.047 | 38.788 | 88.936 | 1.00 | 29.06 |
| ATOM | 579 | O | SER | A | 85 | 26.915 | 39.945 | 88.556 | 1.00 | 29.00 |
| ATOM | 580 | CB | SER | A | 85 | 27.915 | 36.861 | 87.536 | 1.00 | 24.04 |
| ATOM | 581 | OG | SER | A | 85 | 28.903 | 37.746 | 87.028 | 1.00 | 28.11 |
| ATOM | 582 | N | PRO | A | 86 | 27.436 | 38.518 | 90.216 | 1.00 | 29.45 |
| ATOM | 583 | CA | PRO | A | 86 | 27.599 | 39.650 | 91.122 | 1.00 | 26.27 |
| ATOM | 584 | C | PRO | A | 86 | 28.721 | 40.513 | 90.733 | 1.00 | 22.75 |
| ATOM | 585 | O | PRO | A | 86 | 29.830 | 40.064 | 90.530 | 1.00 | 22.43 |
| ATOM | 586 | CB | PRO | A | 86 | 27.873 | 39.029 | 92.493 | 1.00 | 27.52 |
| ATOM | 587 | CG | PRO | A | 86 | 27.284 | 37.627 | 92.399 | 1.00 | 27.61 |
| ATOM | 588 | CD | PRO | A | 86 | 27.591 | 37.258 | 90.945 | 1.00 | 31.08 |
| ATOM | 589 | N | ILE | A | 87 | 28.350 | 41.776 | 90.659 | 1.00 | 22.99 |
| ATOM | 590 | CA | ILE | A | 87 | 29.363 | 42.816 | 90.469 | 1.00 | 24.80 |
| ATOM | 591 | C | ILE | A | 87 | 29.642 | 43.494 | 91.811 | 1.00 | 25.76 |
| ATOM | 592 | O | ILE | A | 87 | 28.956 | 44.424 | 92.220 | 1.00 | 24.68 |
| ATOM | 593 | CB | ILE | A | 87 | 28.908 | 43.860 | 89.427 | 1.00 | 24.26 |
| ATOM | 594 | CG1 | ILE | A | 87 | 28.626 | 43.165 | 88.076 | 1.00 | 23.29 |

【図 2 1】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 595 | CG2 | ILE | A | 87 | 29.997 | 44.923 | 89.306 | 1.00 | 23.62 |
| ATOM | 596 | CD1 | ILE | A | 87 | 27.925 | 44.100 | 87.092 | 1.00 | 21.95 |
| ATOM | 597 | N | THR | A | 88 | 30.655 | 42.914 | 92.481 | 1.00 | 25.86 |
| ATOM | 598 | CA | THR | A | 88 | 30.925 | 43.247 | 93.903 | 1.00 | 25.48 |
| ATOM | 599 | C | THR | A | 88 | 32.418 | 43.249 | 94.166 | 1.00 | 25.25 |
| ATOM | 600 | O | THR | A | 88 | 33.131 | 42.561 | 93.445 | 1.00 | 24.26 |
| ATOM | 601 | CB | THR | A | 88 | 30.332 | 42.211 | 94.859 | 1.00 | 22.31 |
| ATOM | 602 | OG1 | THR | A | 88 | 31.102 | 41.029 | 94.702 | 1.00 | 25.42 |
| ATOM | 603 | CG2 | THR | A | 88 | 28.833 | 41.943 | 94.710 | 1.00 | 19.45 |
| ATOM | 604 | N | GLU | A | 89 | 32.891 | 43.970 | 95.204 | 1.00 | 26.63 |
| ATOM | 605 | CA | GLU | A | 89 | 34.322 | 43.845 | 95.577 | 1.00 | 25.29 |
| ATOM | 606 | C | GLU | A | 89 | 34.810 | 42.429 | 95.889 | 1.00 | 25.30 |
| ATOM | 607 | O | GLU | A | 89 | 35.924 | 41.999 | 95.611 | 1.00 | 26.30 |
| ATOM | 608 | CB | GLU | A | 89 | 34.652 | 44.773 | 96.741 | 1.00 | 25.64 |
| ATOM | 609 | CG | GLU | A | 89 | 34.334 | 46.193 | 96.340 | 1.00 | 26.52 |
| ATOM | 610 | CD | GLU | A | 89 | 34.551 | 47.228 | 97.414 | 1.00 | 29.70 |
| ATOM | 611 | OE1 | GLU | A | 89 | 35.136 | 48.245 | 97.123 | 1.00 | 33.05 |
| ATOM | 612 | OE2 | GLU | A | 89 | 34.138 | 47.077 | 98.540 | 1.00 | 27.59 |
| ATOM | 613 | N | LYS | A | 90 | 33.860 | 41.697 | 96.459 | 1.00 | 26.25 |
| ATOM | 614 | CA | LYS | A | 90 | 34.095 | 40.310 | 96.883 | 1.00 | 28.81 |
| ATOM | 615 | C | LYS | A | 90 | 34.285 | 39.313 | 95.780 | 1.00 | 28.19 |
| ATOM | 616 | O | LYS | A | 90 | 35.206 | 38.518 | 95.773 | 1.00 | 30.49 |
| ATOM | 617 | CB | LYS | A | 90 | 32.889 | 39.869 | 97.672 | 1.00 | 31.00 |
| ATOM | 618 | CG | LYS | A | 90 | 32.956 | 38.478 | 98.228 | 1.00 | 37.00 |
| ATOM | 619 | CD | LYS | A | 90 | 31.536 | 38.026 | 98.583 | 1.00 | 43.53 |
| ATOM | 620 | CE | LYS | A | 90 | 31.386 | 36.504 | 98.712 | 1.00 | 50.17 |
| ATOM | 621 | NZ | LYS | A | 90 | 32.257 | 35.875 | 97.701 | 1.00 | 60.80 |
| ATOM | 622 | N | ASP | A | 91 | 33.324 | 39.416 | 94.870 | 1.00 | 28.68 |
| ATOM | 623 | CA | ASP | A | 91 | 33.271 | 38.504 | 93.738 | 1.00 | 29.34 |
| ATOM | 624 | C | ASP | A | 91 | 33.911 | 38.947 | 92.420 | 1.00 | 29.37 |
| ATOM | 625 | O | ASP | A | 91 | 34.429 | 38.173 | 91.635 | 1.00 | 31.54 |
| ATOM | 626 | CB | ASP | A | 91 | 31.827 | 38.162 | 93.438 | 1.00 | 30.91 |
| ATOM | 627 | CG | ASP | A | 91 | 31.087 | 37.722 | 94.674 | 1.00 | 31.69 |
| ATOM | 628 | OD1 | ASP | A | 91 | 31.395 | 36.657 | 95.212 | 1.00 | 35.66 |
| ATOM | 629 | OD2 | ASP | A | 91 | 30.186 | 38.438 | 95.088 | 1.00 | 29.63 |
| ATOM | 630 | N | ALA | A | 92 | 33.830 | 40.240 | 92.165 | 1.00 | 28.62 |
| ATOM | 631 | CA | ALA | A | 92 | 34.443 | 40.713 | 90.919 | 1.00 | 26.75 |
| ATOM | 632 | C | ALA | A | 92 | 35.255 | 41.981 | 91.131 | 1.00 | 26.94 |
| ATOM | 633 | O | ALA | A | 92 | 34.937 | 43.081 | 90.690 | 1.00 | 26.94 |
| ATOM | 634 | CB | ALA | A | 92 | 33.390 | 40.934 | 89.817 | 1.00 | 23.93 |
| ATOM | 635 | N | PRO | A | 93 | 36.336 | 41.826 | 91.930 | 1.00 | 27.16 |
| ATOM | 636 | CA | PRO | A | 93 | 37.151 | 43.015 | 92.274 | 1.00 | 25.78 |
| ATOM | 637 | C | PRO | A | 93 | 37.832 | 43.865 | 91.160 | 1.00 | 24.62 |
| ATOM | 638 | O | PRO | A | 93 | 37.844 | 45.098 | 91.178 | 1.00 | 22.75 |
| ATOM | 639 | CB | PRO | A | 93 | 38.120 | 42.411 | 93.292 | 1.00 | 25.31 |
| ATOM | 640 | CG | PRO | A | 93 | 38.219 | 40.926 | 92.945 | 1.00 | 23.54 |
| ATOM | 641 | CD | PRO | A | 93 | 36.817 | 40.578 | 92.534 | 1.00 | 25.29 |
| ATOM | 642 | N | ALA | A | 94 | 38.409 | 43.174 | 90.170 | 1.00 | 25.16 |
| ATOM | 643 | CA | ALA | A | 94 | 38.954 | 43.886 | 89.005 | 1.00 | 23.77 |
| ATOM | 644 | C | ALA | A | 94 | 37.923 | 44.715 | 88.249 | 1.00 | 17.72 |
| ATOM | 645 | O | ALA | A | 94 | 38.116 | 45.897 | 88.005 | 1.00 | 19.91 |
| ATOM | 646 | CB | ALA | A | 94 | 39.676 | 42.931 | 88.058 | 1.00 | 21.52 |
| ATOM | 647 | N | LEU | A | 95 | 36.787 | 44.081 | 88.026 | 1.00 | 19.68 |
| ATOM | 648 | CA | LEU | A | 95 | 35.577 | 44.770 | 87.539 | 1.00 | 20.23 |

【図 2 2】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|-----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 649 | C | LEU | A | 95 | 35.001 | 45.902 | 88.385 | 1.00 | 21.85 |
| ATOM | 650 | O | LEU | A | 95 | 34.809 | 47.026 | 87.943 | 1.00 | 21.66 |
| ATOM | 651 | CB | LEU | A | 95 | 34.466 | 43.755 | 87.271 | 1.00 | 20.70 |
| ATOM | 652 | CG | LEU | A | 95 | 33.250 | 44.285 | 86.467 | 1.00 | 21.32 |
| ATOM | 653 | CD1 | LEU | A | 95 | 32.299 | 43.149 | 86.063 | 1.00 | 20.10 |
| ATOM | 654 | CD2 | LEU | A | 95 | 33.698 | 45.111 | 85.240 | 1.00 | 20.93 |
| ATOM | 655 | N | HIS | A | 96 | 34.755 | 45.606 | 89.667 | 1.00 | 21.70 |
| ATOM | 656 | CA | HIS | A | 96 | 34.313 | 46.691 | 90.543 | 1.00 | 17.84 |
| ATOM | 657 | C | HIS | A | 96 | 35.214 | 47.924 | 90.580 | 1.00 | 17.76 |
| ATOM | 658 | O | HIS | A | 96 | 34.767 | 49.069 | 90.496 | 1.00 | 19.44 |
| ATOM | 659 | CB | HIS | A | 96 | 34.042 | 46.116 | 91.937 | 1.00 | 20.62 |
| ATOM | 660 | CG | HIS | A | 96 | 32.934 | 46.893 | 92.613 | 1.00 | 21.96 |
| ATOM | 661 | ND1 | HIS | A | 96 | 33.021 | 48.094 | 93.229 | 1.00 | 21.34 |
| ATOM | 662 | CD2 | HIS | A | 96 | 31.614 | 46.470 | 92.680 | 1.00 | 24.62 |
| ATOM | 663 | CE1 | HIS | A | 96 | 31.790 | 48.442 | 93.690 | 1.00 | 18.16 |
| ATOM | 664 | NE2 | HIS | A | 96 | 30.923 | 47.437 | 93.338 | 1.00 | 23.59 |
| ATOM | 665 | N | LYS | A | 97 | 36.539 | 47.639 | 90.629 | 1.00 | 18.11 |
| ATOM | 666 | CA | LYS | A | 97 | 37.544 | 48.713 | 90.581 | 1.00 | 18.50 |
| ATOM | 667 | C | LYS | A | 97 | 37.519 | 49.564 | 89.317 | 1.00 | 20.80 |
| ATOM | 668 | O | LYS | A | 97 | 37.452 | 50.781 | 89.373 | 1.00 | 21.08 |
| ATOM | 669 | CB | LYS | A | 97 | 38.924 | 48.085 | 90.766 | 1.00 | 17.26 |
| ATOM | 670 | CG | LYS | A | 97 | 40.125 | 49.014 | 90.594 | 1.00 | 21.24 |
| ATOM | 671 | CD | LYS | A | 97 | 40.283 | 50.213 | 91.525 | 1.00 | 30.10 |
| ATOM | 672 | CE | LYS | A | 97 | 41.482 | 51.160 | 91.164 | 1.00 | 33.55 |
| ATOM | 673 | NZ | LYS | A | 97 | 41.557 | 52.449 | 91.915 | 1.00 | 29.55 |
| ATOM | 674 | N | LEU | A | 98 | 37.532 | 48.857 | 88.155 | 1.00 | 22.36 |
| ATOM | 675 | CA | LEU | A | 98 | 37.291 | 49.555 | 86.851 | 1.00 | 22.04 |
| ATOM | 676 | C | LEU | A | 98 | 36.128 | 50.581 | 86.806 | 1.00 | 17.59 |
| ATOM | 677 | O | LEU | A | 98 | 36.223 | 51.763 | 86.522 | 1.00 | 18.13 |
| ATOM | 678 | CB | LEU | A | 98 | 37.025 | 48.477 | 85.780 | 1.00 | 21.44 |
| ATOM | 679 | CG | LEU | A | 98 | 36.766 | 49.042 | 84.375 | 1.00 | 20.93 |
| ATOM | 680 | CD1 | LEU | A | 98 | 36.265 | 47.902 | 83.493 | 1.00 | 22.92 |
| ATOM | 681 | CD2 | LEU | A | 98 | 37.963 | 49.801 | 83.811 | 1.00 | 18.27 |
| ATOM | 682 | N | LEU | A | 99 | 34.977 | 50.024 | 87.188 | 1.00 | 19.16 |
| ATOM | 683 | CA | LEU | A | 99 | 33.753 | 50.802 | 87.186 | 1.00 | 18.37 |
| ATOM | 684 | C | LEU | A | 99 | 33.644 | 51.930 | 88.169 | 1.00 | 20.61 |
| ATOM | 685 | O | LEU | A | 99 | 33.068 | 52.964 | 87.883 | 1.00 | 18.31 |
| ATOM | 686 | CB | LEU | A | 99 | 32.545 | 49.874 | 87.263 | 1.00 | 18.90 |
| ATOM | 687 | CG | LEU | A | 99 | 32.428 | 48.860 | 86.191 | 1.00 | 20.87 |
| ATOM | 688 | CD1 | LEU | A | 99 | 32.464 | 49.503 | 84.841 | 1.00 | 14.73 |
| ATOM | 689 | CD2 | LEU | A | 99 | 31.190 | 48.099 | 86.497 | 1.00 | 19.82 |
| ATOM | 690 | N | THR | A | 100 | 34.252 | 51.692 | 89.359 | 1.00 | 22.03 |
| ATOM | 691 | CA | THR | A | 100 | 34.357 | 52.777 | 90.360 | 1.00 | 19.41 |
| ATOM | 692 | C | THR | A | 100 | 35.259 | 53.938 | 89.957 | 1.00 | 16.72 |
| ATOM | 693 | O | THR | A | 100 | 34.984 | 55.118 | 90.136 | 1.00 | 16.55 |
| ATOM | 694 | CB | THR | A | 100 | 34.889 | 52.174 | 91.674 | 1.00 | 19.50 |
| ATOM | 695 | OG1 | THR | A | 100 | 34.030 | 51.113 | 92.091 | 1.00 | 19.99 |
| ATOM | 696 | CG2 | THR | A | 100 | 35.092 | 53.221 | 92.758 | 1.00 | 21.12 |
| ATOM | 697 | N | ASN | A | 101 | 36.397 | 53.537 | 89.358 | 1.00 | 20.56 |
| ATOM | 698 | CA | ASN | A | 101 | 37.415 | 54.515 | 88.998 | 1.00 | 19.91 |
| ATOM | 699 | C | ASN | A | 101 | 37.022 | 55.479 | 87.873 | 1.00 | 21.88 |
| ATOM | 700 | O | ASN | A | 101 | 37.610 | 56.546 | 87.711 | 1.00 | 22.38 |
| ATOM | 701 | CB | ASN | A | 101 | 38.692 | 53.763 | 88.716 | 1.00 | 20.98 |
| ATOM | 702 | CG | ASN | A | 101 | 39.950 | 54.556 | 89.041 | 1.00 | 22.36 |

【図 2 3】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|-----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 703 | OD1 | ASN | A | 101 | 40.938 | 53.978 | 89.459 | 1.00 | 30.43 |
| ATOM | 704 | ND2 | ASN | A | 101 | 39.964 | 55.868 | 88.889 | 1.00 | 23.45 |
| ATOM | 705 | N | MET | A | 102 | 35.952 | 55.090 | 87.154 | 1.00 | 21.94 |
| ATOM | 706 | CA | MET | A | 102 | 35.407 | 55.984 | 86.103 | 1.00 | 22.28 |
| ATOM | 707 | C | MET | A | 102 | 34.142 | 56.755 | 86.455 | 1.00 | 22.36 |
| ATOM | 708 | O | MET | A | 102 | 33.571 | 57.482 | 85.638 | 1.00 | 23.37 |
| ATOM | 709 | CB | MET | A | 102 | 35.162 | 55.213 | 84.781 | 1.00 | 19.03 |
| ATOM | 710 | CG | MET | A | 102 | 34.239 | 54.001 | 84.972 | 1.00 | 18.05 |
| ATOM | 711 | SD | MET | A | 102 | 33.744 | 53.082 | 83.481 | 1.00 | 20.07 |
| ATOM | 712 | CE | MET | A | 102 | 32.429 | 54.165 | 83.010 | 1.00 | 16.04 |
| ATOM | 713 | N | ILE | A | 103 | 33.681 | 56.555 | 87.724 | 1.00 | 21.00 |
| ATOM | 714 | CA | ILE | A | 103 | 32.441 | 57.221 | 88.180 | 1.00 | 18.78 |
| ATOM | 715 | C | ILE | A | 103 | 32.371 | 58.697 | 87.833 | 1.00 | 17.38 |
| ATOM | 716 | O | ILE | A | 103 | 31.413 | 59.152 | 87.245 | 1.00 | 18.08 |
| ATOM | 717 | CB | ILE | A | 103 | 32.174 | 57.025 | 89.732 | 1.00 | 16.18 |
| ATOM | 718 | CG1 | ILE | A | 103 | 31.696 | 55.603 | 90.031 | 1.00 | 19.21 |
| ATOM | 719 | CG2 | ILE | A | 103 | 31.135 | 58.037 | 90.272 | 1.00 | 12.63 |
| ATOM | 720 | CD1 | ILE | A | 103 | 31.708 | 55.185 | 91.522 | 1.00 | 17.58 |
| ATOM | 721 | N | GLU | A | 104 | 33.426 | 59.429 | 88.218 | 1.00 | 18.81 |
| ATOM | 722 | CA | GLU | A | 104 | 33.369 | 60.900 | 88.092 | 1.00 | 18.36 |
| ATOM | 723 | C | GLU | A | 104 | 33.828 | 61.520 | 86.772 | 1.00 | 19.60 |
| ATOM | 724 | O | GLU | A | 104 | 33.420 | 62.606 | 86.365 | 1.00 | 19.13 |
| ATOM | 725 | CB | GLU | A | 104 | 34.092 | 61.600 | 89.241 | 1.00 | 18.56 |
| ATOM | 726 | CG | GLU | A | 104 | 33.446 | 61.448 | 90.617 | 1.00 | 19.21 |
| ATOM | 727 | CD | GLU | A | 104 | 31.994 | 61.944 | 90.665 | 1.00 | 23.36 |
| ATOM | 728 | OE1 | GLU | A | 104 | 31.225 | 61.359 | 91.382 | 1.00 | 26.94 |
| ATOM | 729 | OE2 | GLU | A | 104 | 31.574 | 62.888 | 90.013 | 1.00 | 28.46 |
| ATOM | 730 | N | ASP | A | 105 | 34.606 | 60.713 | 86.049 | 1.00 | 18.95 |
| ATOM | 731 | CA | ASP | A | 105 | 34.743 | 60.936 | 84.587 | 1.00 | 17.40 |
| ATOM | 732 | C | ASP | A | 105 | 33.378 | 61.099 | 83.886 | 1.00 | 15.12 |
| ATOM | 733 | O | ASP | A | 105 | 33.104 | 62.102 | 83.234 | 1.00 | 18.61 |
| ATOM | 734 | CB | ASP | A | 105 | 35.429 | 59.743 | 83.951 | 1.00 | 16.81 |
| ATOM | 735 | CG | ASP | A | 105 | 36.831 | 59.545 | 84.440 | 1.00 | 15.10 |
| ATOM | 736 | OD1 | ASP | A | 105 | 37.573 | 60.520 | 84.573 | 1.00 | 19.01 |
| ATOM | 737 | OD2 | ASP | A | 105 | 37.177 | 58.402 | 84.685 | 1.00 | 15.56 |
| ATOM | 738 | N | ALA | A | 106 | 32.500 | 60.091 | 84.096 | 1.00 | 15.05 |
| ATOM | 739 | CA | ALA | A | 106 | 31.111 | 60.157 | 83.607 | 1.00 | 15.61 |
| ATOM | 740 | C | ALA | A | 106 | 30.166 | 61.126 | 84.315 | 1.00 | 19.62 |
| ATOM | 741 | O | ALA | A | 106 | 29.409 | 61.881 | 83.720 | 1.00 | 18.83 |
| ATOM | 742 | CB | ALA | A | 106 | 30.467 | 58.782 | 83.682 | 1.00 | 11.73 |
| ATOM | 743 | N | GLY | A | 107 | 30.263 | 61.102 | 85.674 | 1.00 | 21.49 |
| ATOM | 744 | CA | GLY | A | 107 | 29.323 | 61.899 | 86.503 | 1.00 | 16.83 |
| ATOM | 745 | C | GLY | A | 107 | 29.599 | 63.356 | 86.594 | 1.00 | 14.80 |
| ATOM | 746 | O | GLY | A | 107 | 28.714 | 64.204 | 86.575 | 1.00 | 17.67 |
| ATOM | 747 | N | ASP | A | 108 | 30.899 | 63.611 | 86.662 | 1.00 | 16.37 |
| ATOM | 748 | CA | ASP | A | 108 | 31.305 | 65.002 | 86.772 | 1.00 | 17.18 |
| ATOM | 749 | C | ASP | A | 108 | 31.877 | 65.572 | 85.485 | 1.00 | 18.56 |
| ATOM | 750 | O | ASP | A | 108 | 31.324 | 66.472 | 84.877 | 1.00 | 18.77 |
| ATOM | 751 | CB | ASP | A | 108 | 32.282 | 65.144 | 87.947 | 1.00 | 16.92 |
| ATOM | 752 | CG | ASP | A | 108 | 32.862 | 66.530 | 88.143 | 1.00 | 21.34 |
| ATOM | 753 | OD1 | ASP | A | 108 | 32.247 | 67.528 | 87.812 | 1.00 | 23.69 |
| ATOM | 754 | OD2 | ASP | A | 108 | 33.983 | 66.642 | 88.614 | 1.00 | 27.32 |
| ATOM | 755 | N | LEU | A | 109 | 33.049 | 65.065 | 85.107 | 1.00 | 18.48 |
| ATOM | 756 | CA | LEU | A | 109 | 33.814 | 65.703 | 84.005 | 1.00 | 20.77 |

【図 2 4】

| | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 757 | C | LEU A 109 | 32.954 | 65.922 | 82.752 | 1.00 | 21.46 |
| ATOM | 758 | O | LEU A 109 | 32.905 | 67.026 | 82.199 | 1.00 | 23.24 |
| ATOM | 759 | CB | LEU A 109 | 35.024 | 64.826 | 83.679 | 1.00 | 20.60 |
| ATOM | 760 | CG | LEU A 109 | 36.393 | 65.285 | 84.113 | 1.00 | 21.65 |
| ATOM | 761 | CD1 | LEU A 109 | 37.408 | 64.213 | 84.096 | 1.00 | 17.20 |
| ATOM | 762 | CD2 | LEU A 109 | 36.469 | 66.186 | 85.254 | 1.00 | 20.25 |
| ATOM | 763 | N | ALA A 110 | 32.206 | 64.812 | 82.422 | 1.00 | 21.81 |
| ATOM | 764 | CA | ALA A 110 | 31.336 | 64.771 | 81.215 | 1.00 | 20.79 |
| ATOM | 765 | C | ALA A 110 | 30.074 | 65.608 | 81.232 | 1.00 | 23.23 |
| ATOM | 766 | O | ALA A 110 | 29.504 | 65.885 | 80.182 | 1.00 | 23.66 |
| ATOM | 767 | CB | ALA A 110 | 30.921 | 63.333 | 80.868 | 1.00 | 20.49 |
| ATOM | 768 | N | THR A 111 | 29.672 | 66.038 | 82.465 | 1.00 | 20.15 |
| ATOM | 769 | CA | THR A 111 | 28.453 | 66.863 | 82.653 | 1.00 | 19.21 |
| ATOM | 770 | C | THR A 111 | 28.654 | 68.292 | 83.132 | 1.00 | 18.58 |
| ATOM | 771 | O | THR A 111 | 27.754 | 69.106 | 83.131 | 1.00 | 18.77 |
| ATOM | 772 | CB | THR A 111 | 27.469 | 66.257 | 83.628 | 1.00 | 18.46 |
| ATOM | 773 | OG1 | THR A 111 | 28.011 | 66.399 | 84.949 | 1.00 | 23.25 |
| ATOM | 774 | CG2 | THR A 111 | 27.094 | 64.802 | 83.347 | 1.00 | 15.78 |
| ATOM | 775 | N | ARG A 112 | 29.870 | 68.595 | 83.547 | 1.00 | 20.94 |
| ATOM | 776 | CA | ARG A 112 | 30.068 | 69.805 | 84.369 | 1.00 | 22.62 |
| ATOM | 777 | C | ARG A 112 | 29.745 | 71.185 | 83.786 | 1.00 | 23.68 |
| ATOM | 778 | O | ARG A 112 | 29.035 | 72.025 | 84.325 | 1.00 | 21.09 |
| ATOM | 779 | CB | ARG A 112 | 31.512 | 69.782 | 84.911 | 1.00 | 22.88 |
| ATOM | 780 | CG | ARG A 112 | 31.847 | 70.852 | 85.952 | 1.00 | 22.67 |
| ATOM | 781 | CD | ARG A 112 | 33.319 | 70.922 | 86.319 | 1.00 | 18.55 |
| ATOM | 782 | NE | ARG A 112 | 33.831 | 69.709 | 86.930 | 1.00 | 22.11 |
| ATOM | 783 | CZ | ARG A 112 | 35.138 | 69.496 | 86.853 | 1.00 | 21.99 |
| ATOM | 784 | NH1 | ARG A 112 | 35.949 | 70.322 | 86.227 | 1.00 | 23.29 |
| ATOM | 785 | NH2 | ARG A 112 | 35.623 | 68.436 | 87.414 | 1.00 | 23.83 |
| ATOM | 786 | N | SER A 113 | 30.323 | 71.398 | 82.583 | 1.00 | 21.66 |
| ATOM | 787 | CA | SER A 113 | 30.146 | 72.736 | 81.981 | 1.00 | 19.14 |
| ATOM | 788 | C | SER A 113 | 28.721 | 73.124 | 81.629 | 1.00 | 20.09 |
| ATOM | 789 | O | SER A 113 | 28.288 | 74.263 | 81.806 | 1.00 | 23.06 |
| ATOM | 790 | CB | SER A 113 | 31.029 | 72.919 | 80.732 | 1.00 | 24.64 |
| ATOM | 791 | OG | SER A 113 | 30.812 | 71.854 | 79.778 | 1.00 | 25.18 |
| ATOM | 792 | N | ALA A 114 | 27.955 | 72.094 | 81.186 | 1.00 | 19.43 |
| ATOM | 793 | CA | ALA A 114 | 26.510 | 72.272 | 80.944 | 1.00 | 17.15 |
| ATOM | 794 | C | ALA A 114 | 25.695 | 72.377 | 82.247 | 1.00 | 16.95 |
| ATOM | 795 | O | ALA A 114 | 24.890 | 73.293 | 82.402 | 1.00 | 17.79 |
| ATOM | 796 | CB | ALA A 114 | 25.935 | 71.096 | 80.117 | 1.00 | 15.05 |
| ATOM | 797 | N | LYS A 115 | 25.993 | 71.462 | 83.200 | 1.00 | 18.76 |
| ATOM | 798 | CA | LYS A 115 | 25.431 | 71.618 | 84.559 | 1.00 | 20.52 |
| ATOM | 799 | C | LYS A 115 | 25.524 | 73.029 | 85.143 | 1.00 | 18.24 |
| ATOM | 800 | O | LYS A 115 | 24.535 | 73.710 | 85.429 | 1.00 | 19.61 |
| ATOM | 801 | CB | LYS A 115 | 26.048 | 70.606 | 85.508 | 1.00 | 17.41 |
| ATOM | 802 | CG | LYS A 115 | 25.304 | 69.294 | 85.482 | 1.00 | 22.93 |
| ATOM | 803 | CD | LYS A 115 | 25.867 | 68.477 | 86.654 | 1.00 | 26.73 |
| ATOM | 804 | CE | LYS A 115 | 25.353 | 67.039 | 86.850 | 1.00 | 26.14 |
| ATOM | 805 | NZ | LYS A 115 | 23.888 | 67.023 | 87.009 | 1.00 | 26.36 |
| ATOM | 806 | N | ASP A 116 | 26.784 | 73.454 | 85.203 | 1.00 | 19.25 |
| ATOM | 807 | CA | ASP A 116 | 27.073 | 74.739 | 85.832 | 1.00 | 20.02 |
| ATOM | 808 | C | ASP A 116 | 26.589 | 75.938 | 85.076 | 1.00 | 23.51 |
| ATOM | 809 | O | ASP A 116 | 26.208 | 76.967 | 85.612 | 1.00 | 24.69 |
| ATOM | 810 | CB | ASP A 116 | 28.573 | 74.896 | 86.053 | 1.00 | 22.26 |

【図 2 5】

| | | | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----|---|-----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 811 | CG | ASP | A | 116 | 29.203 | 73.871 | 87.029 | 1.00 | 25.80 |
| ATOM | 812 | OD1 | ASP | A | 116 | 28.502 | 73.085 | 87.657 | 1.00 | 27.77 |
| ATOM | 813 | OD2 | ASP | A | 116 | 30.431 | 73.847 | 87.166 | 1.00 | 28.44 |
| ATOM | 814 | N | HIS | A | 117 | 26.596 | 75.793 | 83.741 | 1.00 | 23.53 |
| ATOM | 815 | CA | HIS | A | 117 | 26.022 | 76.894 | 82.957 | 1.00 | 21.71 |
| ATOM | 816 | C | HIS | A | 117 | 24.496 | 77.044 | 83.026 | 1.00 | 20.75 |
| ATOM | 817 | O | HIS | A | 117 | 23.932 | 78.108 | 83.223 | 1.00 | 20.51 |
| ATOM | 818 | CB | HIS | A | 117 | 26.536 | 76.787 | 81.501 | 1.00 | 22.93 |
| ATOM | 819 | CG | HIS | A | 117 | 25.987 | 77.909 | 80.635 | 1.00 | 22.08 |
| ATOM | 820 | ND1 | HIS | A | 117 | 26.531 | 79.128 | 80.459 | 1.00 | 23.33 |
| ATOM | 821 | CD2 | HIS | A | 117 | 24.824 | 77.852 | 79.881 | 1.00 | 22.30 |
| ATOM | 822 | CE1 | HIS | A | 117 | 25.741 | 79.836 | 79.615 | 1.00 | 23.49 |
| ATOM | 823 | NE2 | HIS | A | 117 | 24.693 | 79.041 | 79.262 | 1.00 | 23.57 |
| ATOM | 824 | N | TYR | A | 118 | 23.825 | 75.906 | 82.825 | 1.00 | 19.95 |
| ATOM | 825 | CA | TYR | A | 118 | 22.363 | 76.013 | 82.795 | 1.00 | 19.91 |
| ATOM | 826 | C | TYR | A | 118 | 21.711 | 76.075 | 84.159 | 1.00 | 22.89 |
| ATOM | 827 | O | TYR | A | 118 | 20.615 | 76.596 | 84.278 | 1.00 | 22.53 |
| ATOM | 828 | CB | TYR | A | 118 | 21.702 | 74.869 | 82.020 | 1.00 | 18.70 |
| ATOM | 829 | CG | TYR | A | 118 | 22.112 | 74.964 | 80.550 | 1.00 | 19.86 |
| ATOM | 830 | CD1 | TYR | A | 118 | 21.604 | 76.030 | 79.775 | 1.00 | 20.81 |
| ATOM | 831 | CD2 | TYR | A | 118 | 22.998 | 74.004 | 80.005 | 1.00 | 20.19 |
| ATOM | 832 | CE1 | TYR | A | 118 | 21.964 | 76.104 | 78.410 | 1.00 | 24.18 |
| ATOM | 833 | CE2 | TYR | A | 118 | 23.393 | 74.097 | 78.652 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 834 | CZ | TYR | A | 118 | 22.841 | 75.133 | 77.869 | 1.00 | 24.85 |
| ATOM | 835 | OH | TYR | A | 118 | 23.138 | 75.231 | 76.525 | 1.00 | 25.02 |
| ATOM | 836 | N | MET | A | 119 | 22.385 | 75.453 | 85.158 | 1.00 | 22.72 |
| ATOM | 837 | CA | MET | A | 119 | 21.795 | 75.408 | 86.516 | 1.00 | 25.49 |
| ATOM | 838 | C | MET | A | 119 | 20.328 | 75.033 | 86.619 | 1.00 | 22.79 |
| ATOM | 839 | O | MET | A | 119 | 19.526 | 75.639 | 87.309 | 1.00 | 23.65 |
| ATOM | 840 | CB | MET | A | 119 | 22.009 | 76.758 | 87.200 | 1.00 | 31.90 |
| ATOM | 841 | CG | MET | A | 119 | 23.479 | 77.200 | 87.296 | 1.00 | 41.79 |
| ATOM | 842 | SD | MET | A | 119 | 23.683 | 78.779 | 88.163 | 1.00 | 50.25 |
| ATOM | 843 | CE | MET | A | 119 | 22.932 | 79.838 | 86.910 | 1.00 | 48.37 |
| ATOM | 844 | N | ARG | A | 120 | 19.958 | 74.021 | 85.840 | 1.00 | 21.05 |
| ATOM | 845 | CA | ARG | A | 120 | 18.529 | 73.782 | 85.704 | 1.00 | 19.45 |
| ATOM | 846 | C | ARG | A | 120 | 17.877 | 73.247 | 86.989 | 1.00 | 16.34 |
| ATOM | 847 | O | ARG | A | 120 | 18.483 | 72.369 | 87.587 | 1.00 | 17.21 |
| ATOM | 848 | CB | ARG | A | 120 | 18.345 | 72.757 | 84.558 | 1.00 | 16.25 |
| ATOM | 849 | CG | ARG | A | 120 | 16.913 | 72.517 | 84.063 | 1.00 | 17.39 |
| ATOM | 850 | CD | ARG | A | 120 | 16.775 | 71.558 | 82.842 | 1.00 | 19.83 |
| ATOM | 851 | NE | ARG | A | 120 | 15.450 | 71.636 | 82.189 | 1.00 | 20.39 |
| ATOM | 852 | CZ | ARG | A | 120 | 14.929 | 70.642 | 81.479 | 1.00 | 12.14 |
| ATOM | 853 | NH1 | ARG | A | 120 | 15.600 | 69.574 | 81.259 | 1.00 | 12.74 |
| ATOM | 854 | NH2 | ARG | A | 120 | 13.724 | 70.767 | 81.007 | 1.00 | 15.75 |
| ATOM | 855 | N | ILE | A | 121 | 16.676 | 73.723 | 87.290 | 1.00 | 16.46 |
| ATOM | 856 | CA | ILE | A | 121 | 15.807 | 73.186 | 88.360 | 1.00 | 22.91 |
| ATOM | 857 | C | ILE | A | 121 | 15.258 | 71.795 | 88.080 | 1.00 | 23.50 |
| ATOM | 858 | O | ILE | A | 121 | 14.648 | 71.571 | 87.043 | 1.00 | 26.14 |
| ATOM | 859 | CB | ILE | A | 121 | 14.594 | 74.134 | 88.686 | 1.00 | 25.98 |
| ATOM | 860 | CG1 | ILE | A | 121 | 14.986 | 75.592 | 88.783 | 1.00 | 29.16 |
| ATOM | 861 | CG2 | ILE | A | 121 | 13.793 | 73.870 | 89.982 | 1.00 | 23.20 |
| ATOM | 862 | CD1 | ILE | A | 121 | 16.075 | 75.914 | 89.785 | 1.00 | 29.73 |
| ATOM | 863 | N | ARG | A | 122 | 15.463 | 70.877 | 89.036 | 1.00 | 21.01 |
| ATOM | 864 | CA | ARG | A | 122 | 14.883 | 69.534 | 88.976 | 1.00 | 19.80 |

【図 26】

| | | | | | | | | |
|------|-----|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 865 | C | ARG A 122 | 13.372 | 69.532 | 89.091 | 1.00 | 17.61 |
| ATOM | 866 | O | ARG A 122 | 12.805 | 70.488 | 89.613 | 1.00 | 18.79 |
| ATOM | 867 | CB | ARG A 122 | 15.533 | 68.653 | 90.033 | 1.00 | 17.47 |
| ATOM | 868 | CG | ARG A 122 | 17.023 | 68.706 | 89.841 | 1.00 | 18.78 |
| ATOM | 869 | CD | ARG A 122 | 17.721 | 67.861 | 90.852 | 1.00 | 21.00 |
| ATOM | 870 | NE | ARG A 122 | 19.141 | 68.121 | 90.748 | 1.00 | 28.80 |
| ATOM | 871 | CZ | ARG A 122 | 19.914 | 67.081 | 90.491 | 1.00 | 34.31 |
| ATOM | 872 | NH1 | ARG A 122 | 19.401 | 65.871 | 90.426 | 1.00 | 40.28 |
| ATOM | 873 | NH2 | ARG A 122 | 21.196 | 67.257 | 90.289 | 1.00 | 32.47 |
| ATOM | 874 | N | PRO A 123 | 12.700 | 68.460 | 88.577 | 1.00 | 17.64 |
| ATOM | 875 | CA | PRO A 123 | 11.243 | 68.461 | 88.684 | 1.00 | 18.56 |
| ATOM | 876 | C | PRO A 123 | 10.668 | 68.630 | 90.118 | 1.00 | 20.86 |
| ATOM | 877 | O | PRO A 123 | 9.881 | 69.536 | 90.331 | 1.00 | 20.65 |
| ATOM | 878 | CB | PRO A 123 | 10.808 | 67.150 | 88.004 | 1.00 | 16.86 |
| ATOM | 879 | CG | PRO A 123 | 12.028 | 66.572 | 87.296 | 1.00 | 15.55 |
| ATOM | 880 | CD | PRO A 123 | 13.235 | 67.291 | 87.881 | 1.00 | 15.48 |
| ATOM | 881 | N | PHE A 124 | 11.077 | 67.771 | 91.105 | 1.00 | 21.82 |
| ATOM | 882 | CA | PHE A 124 | 10.489 | 67.948 | 92.468 | 1.00 | 20.01 |
| ATOM | 883 | C | PHE A 124 | 10.541 | 69.394 | 93.016 | 1.00 | 16.73 |
| ATOM | 884 | O | PHE A 124 | 9.581 | 69.970 | 93.486 | 1.00 | 17.82 |
| ATOM | 885 | CB | PHE A 124 | 11.044 | 66.869 | 93.422 | 1.00 | 17.84 |
| ATOM | 886 | CG | PHE A 124 | 12.484 | 67.199 | 93.795 | 1.00 | 19.87 |
| ATOM | 887 | CD1 | PHE A 124 | 12.748 | 68.117 | 94.850 | 1.00 | 20.96 |
| ATOM | 888 | CD2 | PHE A 124 | 13.554 | 66.632 | 93.075 | 1.00 | 19.87 |
| ATOM | 889 | CE1 | PHE A 124 | 14.068 | 68.524 | 95.134 | 1.00 | 21.78 |
| ATOM | 890 | CE2 | PHE A 124 | 14.881 | 67.014 | 93.381 | 1.00 | 21.98 |
| ATOM | 891 | CZ | PHE A 124 | 15.129 | 67.975 | 94.386 | 1.00 | 23.27 |
| ATOM | 892 | N | ALA A 125 | 11.681 | 70.039 | 92.775 | 1.00 | 18.30 |
| ATOM | 893 | CA | ALA A 125 | 11.866 | 71.464 | 93.089 | 1.00 | 20.06 |
| ATOM | 894 | C | ALA A 125 | 11.033 | 72.481 | 92.291 | 1.00 | 24.90 |
| ATOM | 895 | O | ALA A 125 | 10.455 | 73.445 | 92.789 | 1.00 | 24.77 |
| ATOM | 896 | CB | ALA A 125 | 13.358 | 71.840 | 92.990 | 1.00 | 16.96 |
| ATOM | 897 | N | PHE A 126 | 10.941 | 72.202 | 90.977 | 1.00 | 23.91 |
| ATOM | 898 | CA | PHE A 126 | 10.017 | 72.958 | 90.145 | 1.00 | 22.66 |
| ATOM | 899 | C | PHE A 126 | 8.590 | 72.919 | 90.692 | 1.00 | 20.74 |
| ATOM | 900 | O | PHE A 126 | 7.910 | 73.945 | 90.785 | 1.00 | 21.66 |
| ATOM | 901 | CB | PHE A 126 | 10.051 | 72.379 | 88.705 | 1.00 | 19.61 |
| ATOM | 902 | CG | PHE A 126 | 9.147 | 73.140 | 87.765 | 1.00 | 16.99 |
| ATOM | 903 | CD1 | PHE A 126 | 9.669 | 74.211 | 87.022 | 1.00 | 15.15 |
| ATOM | 904 | CD2 | PHE A 126 | 7.794 | 72.757 | 87.656 | 1.00 | 17.75 |
| ATOM | 905 | CE1 | PHE A 126 | 8.824 | 74.913 | 86.144 | 1.00 | 14.16 |
| ATOM | 906 | CE2 | PHE A 126 | 6.940 | 73.472 | 86.799 | 1.00 | 17.56 |
| ATOM | 907 | CZ | PHE A 126 | 7.471 | 74.538 | 86.048 | 1.00 | 12.93 |
| ATOM | 908 | N | TYR A 127 | 8.183 | 71.664 | 91.002 | 1.00 | 20.13 |
| ATOM | 909 | CA | TYR A 127 | 6.843 | 71.414 | 91.525 | 1.00 | 20.41 |
| ATOM | 910 | C | TYR A 127 | 6.642 | 71.689 | 93.032 | 1.00 | 24.41 |
| ATOM | 911 | O | TYR A 127 | 5.525 | 71.665 | 93.532 | 1.00 | 23.70 |
| ATOM | 912 | CB | TYR A 127 | 6.370 | 69.994 | 91.207 | 1.00 | 20.85 |
| ATOM | 913 | CG | TYR A 127 | 6.198 | 69.850 | 89.697 | 1.00 | 25.51 |
| ATOM | 914 | CD1 | TYR A 127 | 7.200 | 69.185 | 88.947 | 1.00 | 27.02 |
| ATOM | 915 | CD2 | TYR A 127 | 5.064 | 70.407 | 89.065 | 1.00 | 25.24 |
| ATOM | 916 | CE1 | TYR A 127 | 7.057 | 69.037 | 87.552 | 1.00 | 28.75 |
| ATOM | 917 | CE2 | TYR A 127 | 4.907 | 70.261 | 87.663 | 1.00 | 28.24 |
| ATOM | 918 | CZ | TYR A 127 | 5.891 | 69.543 | 86.936 | 1.00 | 28.76 |

【図 2 7】

| | | | | | | | | |
|------|-----|------|-----------|--------|--------|---------|------|--------|
| ATOM | 919 | OH | TYR A 127 | 5.716 | 69.314 | 85.588 | 1.00 | 27.53 |
| ATOM | 920 | N | GLY A 128 | 7.764 | 71.960 | 93.723 | 1.00 | 23.74 |
| ATOM | 921 | CA | GLY A 128 | 7.675 | 72.217 | 95.170 | 1.00 | 24.88 |
| ATOM | 922 | C | GLY A 128 | 7.138 | 71.011 | 95.924 | 1.00 | 24.57 |
| ATOM | 923 | O | GLY A 128 | 6.383 | 71.095 | 96.866 | 1.00 | 29.82 |
| ATOM | 924 | N | VAL A 129 | 7.527 | 69.854 | 95.426 | 1.00 | 24.16 |
| ATOM | 925 | CA | VAL A 129 | 7.144 | 68.604 | 96.044 | 1.00 | 23.21 |
| ATOM | 926 | C | VAL A 129 | 8.377 | 67.802 | 96.358 | 1.00 | 24.99 |
| ATOM | 927 | O | VAL A 129 | 9.529 | 68.188 | 96.189 | 1.00 | 25.90 |
| ATOM | 928 | CB | VAL A 129 | 6.193 | 67.776 | 95.187 | 1.00 | 22.38 |
| ATOM | 929 | CG1 | VAL A 129 | 6.738 | 67.390 | 93.815 | 1.00 | 17.75 |
| ATOM | 930 | CG2 | VAL A 129 | 4.895 | 68.549 | 95.125 | 1.00 | 24.52 |
| ATOM | 931 | N | SER A 130 | 8.089 | 66.617 | 96.832 | 1.00 | 25.98 |
| ATOM | 932 | CA | SER A 130 | 9.242 | 65.724 | 96.973 | 1.00 | 29.71 |
| ATOM | 933 | C | SER A 130 | 9.322 | 64.672 | 95.895 | 1.00 | 29.73 |
| ATOM | 934 | O | SER A 130 | 8.403 | 64.485 | 95.103 | 1.00 | 30.28 |
| ATOM | 935 | CB | SER A 130 | 9.183 | 64.999 | 98.309 | 1.00 | 35.36 |
| ATOM | 936 | OG | SER A 130 | 7.964 | 64.244 | 98.427 | 1.00 | 41.61 |
| ATOM | 937 | N | THR A 131 | 10.440 | 63.952 | 95.934 | 1.00 | 30.35 |
| ATOM | 938 | CA | THR A 131 | 10.533 | 62.819 | 94.996 | 1.00 | 27.90 |
| ATOM | 939 | C | THR A 131 | 9.733 | 61.569 | 95.361 | 1.00 | 28.80 |
| ATOM | 940 | O | THR A 131 | 9.051 | 61.508 | 96.366 | 1.00 | 30.16 |
| ATOM | 941 | CB | THR A 131 | 11.996 | 62.471 | 94.783 | 1.00 | 26.62 |
| ATOM | 942 | OG1 | THR A 131 | 12.500 | 61.841 | 95.953 | 1.00 | 29.21 |
| ATOM | 943 | CG2 | THR A 131 | 12.839 | 63.682 | 94.446 | 1.00 | 19.32 |
| ATOM | 944 | N | CYS A 132 | 9.835 | 60.528 | 94.551 | 1.00 | 27.12 |
| ATOM | 945 | CA | CYS A 132 | 9.203 | 59.271 | 94.996 | 1.00 | 27.75 |
| ATOM | 946 | C | CYS A 132 | 9.911 | 58.540 | 96.137 | 1.00 | 28.96 |
| ATOM | 947 | O | CYS A 132 | 9.556 | 57.487 | 96.634 | 1.00 | 28.80 |
| ATOM | 948 | CB | CYS A 132 | 9.081 | 58.274 | 93.831 | 1.00 | 24.68 |
| ATOM | 949 | SG | CYS A 132 | 10.538 | 57.273 | 93.459 | 1.00 | 24.12 |
| ATOM | 950 | N | ASN A 133 | 11.021 | 59.158 | 96.447 | 1.00 | 33.31 |
| ATOM | 951 | CA | ASN A 133 | 12.012 | 58.492 | 97.236 | 1.00 | 39.44 |
| ATOM | 952 | C | ASN A 133 | 12.008 | 58.776 | 98.750 | 1.00 | 45.19 |
| ATOM | 953 | O | ASN A 133 | 12.269 | 57.928 | 99.583 | 1.00 | 50.38 |
| ATOM | 954 | CB | ASN A 133 | 13.285 | 58.876 | 96.522 | 1.00 | 35.83 |
| ATOM | 955 | CG | ASN A 133 | 14.294 | 57.823 | 96.731 | 1.00 | 37.18 |
| ATOM | 956 | OD1 | ASN A 133 | 15.478 | 58.059 | 96.663 | 1.00 | 38.83 |
| ATOM | 957 | ND2 | ASN A 133 | 13.815 | 56.623 | 97.017 | 1.00 | 42.51 |
| ATOM | 958 | N | THR A 134 | 11.642 | 59.993 | 99.118 | 1.00 | 48.69 |
| ATOM | 959 | CA | THR A 134 | 12.585 | 61.110 | 98.925 | 1.00 | 56.17 |
| ATOM | 960 | C | THR A 134 | 13.935 | 61.171 | 99.735 | 1.00 | 61.49 |
| ATOM | 961 | OCT1 | THR A 134 | 14.052 | 60.565 | 100.816 | 1.00 | 66.36 |
| ATOM | 962 | OCT2 | THR A 134 | 14.937 | 61.779 | 99.291 | 1.00 | 63.18 |
| ATOM | 963 | CB | THR A 134 | 11.704 | 62.374 | 98.968 | 1.00 | 56.04 |
| ATOM | 964 | OG1 | THR A 134 | 12.306 | 63.614 | 98.469 | 1.00 | 56.23 |
| ATOM | 965 | CG2 | THR A 134 | 10.869 | 62.400 | 100.243 | 1.00 | 53.77 |
| ATOM | 966 | N | GLN A 137 | 16.953 | 60.437 | 100.819 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 967 | CA | GLN A 137 | 17.845 | 60.498 | 102.027 | 1.00 | 99.78 |
| ATOM | 968 | C | GLN A 137 | 19.036 | 61.512 | 102.211 | 1.00 | 98.61 |
| ATOM | 969 | O | GLN A 137 | 19.386 | 61.891 | 103.324 | 1.00 | 97.54 |
| ATOM | 970 | CB | GLN A 137 | 18.343 | 59.083 | 102.397 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 971 | CG | GLN A 137 | 17.669 | 58.407 | 103.615 | 1.00 | 99.38 |
| ATOM | 972 | CD | GLN A 137 | 18.060 | 59.017 | 104.963 | 1.00 | 98.64 |

【図 2 8】

| | | | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----|---|-----|--------|--------|---------|------|--------|
| ATOM | 973 | OE1 | GLN | A | 137 | 17.484 | 58.784 | 106.009 | 1.00 | 98.03 |
| ATOM | 974 | NE2 | GLN | A | 137 | 19.086 | 59.847 | 104.972 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 975 | N | ASP | A | 138 | 19.627 | 61.949 | 101.081 | 1.00 | 97.91 |
| ATOM | 976 | CA | ASP | A | 138 | 20.479 | 63.151 | 101.162 | 1.00 | 95.99 |
| ATOM | 977 | C | ASP | A | 138 | 19.761 | 64.494 | 101.063 | 1.00 | 93.86 |
| ATOM | 978 | O | ASP | A | 138 | 18.589 | 64.579 | 100.711 | 1.00 | 92.76 |
| ATOM | 979 | CB | ASP | A | 138 | 21.585 | 63.102 | 100.115 | 1.00 | 97.46 |
| ATOM | 980 | CG | ASP | A | 138 | 22.893 | 62.963 | 100.866 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 981 | OD1 | ASP | A | 138 | 23.371 | 61.842 | 101.028 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 982 | OD2 | ASP | A | 138 | 23.432 | 63.969 | 101.333 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 983 | N | LYS | A | 139 | 20.494 | 65.564 | 101.380 | 1.00 | 92.69 |
| ATOM | 984 | CA | LYS | A | 139 | 19.813 | 66.855 | 101.218 | 1.00 | 91.50 |
| ATOM | 985 | C | LYS | A | 139 | 19.719 | 67.313 | 99.775 | 1.00 | 88.92 |
| ATOM | 986 | O | LYS | A | 139 | 20.557 | 68.082 | 99.308 | 1.00 | 89.47 |
| ATOM | 987 | CB | LYS | A | 139 | 20.464 | 67.987 | 102.010 | 1.00 | 94.21 |
| ATOM | 988 | CG | LYS | A | 139 | 19.574 | 69.246 | 102.020 | 1.00 | 96.82 |
| ATOM | 989 | CD | LYS | A | 139 | 20.362 | 70.569 | 102.123 | 1.00 | 99.43 |
| ATOM | 990 | CE | LYS | A | 139 | 20.785 | 71.241 | 100.793 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 991 | NZ | LYS | A | 139 | 21.686 | 70.402 | 99.978 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 992 | N | LEU | A | 140 | 18.654 | 66.828 | 99.114 | 1.00 | 85.87 |
| ATOM | 993 | CA | LEU | A | 140 | 18.426 | 67.018 | 97.660 | 1.00 | 79.60 |
| ATOM | 994 | C | LEU | A | 140 | 18.772 | 68.392 | 97.043 | 1.00 | 75.62 |
| ATOM | 995 | O | LEU | A | 140 | 18.242 | 69.442 | 97.416 | 1.00 | 75.74 |
| ATOM | 996 | CB | LEU | A | 140 | 16.981 | 66.620 | 97.283 | 1.00 | 77.27 |
| ATOM | 997 | CG | LEU | A | 140 | 16.640 | 65.142 | 97.462 | 1.00 | 74.31 |
| ATOM | 998 | CD1 | LEU | A | 140 | 17.569 | 64.263 | 96.645 | 1.00 | 73.21 |
| ATOM | 999 | CD2 | LEU | A | 140 | 15.178 | 64.838 | 97.167 | 1.00 | 73.91 |
| ATOM | 1000 | N | SER | A | 141 | 19.713 | 68.357 | 96.067 | 1.00 | 70.08 |
| ATOM | 1001 | CA | SER | A | 141 | 19.868 | 69.619 | 95.320 | 1.00 | 64.86 |
| ATOM | 1002 | C | SER | A | 141 | 18.713 | 69.941 | 94.396 | 1.00 | 61.18 |
| ATOM | 1003 | O | SER | A | 141 | 18.189 | 69.080 | 93.708 | 1.00 | 61.77 |
| ATOM | 1004 | CB | SER | A | 141 | 21.127 | 69.682 | 94.461 | 1.00 | 64.49 |
| ATOM | 1005 | OG | SER | A | 141 | 21.354 | 71.028 | 94.002 | 1.00 | 66.43 |
| ATOM | 1006 | N | LYS | A | 142 | 18.349 | 71.235 | 94.379 | 1.00 | 57.81 |
| ATOM | 1007 | CA | LYS | A | 142 | 17.238 | 71.661 | 93.493 | 1.00 | 54.35 |
| ATOM | 1008 | C | LYS | A | 142 | 17.498 | 71.829 | 91.964 | 1.00 | 45.94 |
| ATOM | 1009 | O | LYS | A | 142 | 16.615 | 72.091 | 91.202 | 1.00 | 40.89 |
| ATOM | 1010 | CB | LYS | A | 142 | 16.631 | 72.953 | 94.061 | 1.00 | 57.69 |
| ATOM | 1011 | CG | LYS | A | 142 | 17.518 | 74.222 | 93.959 | 1.00 | 62.63 |
| ATOM | 1012 | CD | LYS | A | 142 | 16.625 | 75.420 | 93.545 | 1.00 | 68.07 |
| ATOM | 1013 | CE | LYS | A | 142 | 17.200 | 76.856 | 93.475 | 1.00 | 71.28 |
| ATOM | 1014 | NZ | LYS | A | 142 | 16.136 | 77.844 | 93.162 | 1.00 | 70.88 |
| ATOM | 1015 | N | ASN | A | 143 | 18.772 | 71.719 | 91.611 | 1.00 | 45.99 |
| ATOM | 1016 | CA | ASN | A | 143 | 19.527 | 72.392 | 90.538 | 1.00 | 44.71 |
| ATOM | 1017 | C | ASN | A | 143 | 20.592 | 71.481 | 89.878 | 1.00 | 42.57 |
| ATOM | 1018 | O | ASN | A | 143 | 20.794 | 70.322 | 90.283 | 1.00 | 40.17 |
| ATOM | 1019 | CB | ASN | A | 143 | 20.343 | 73.547 | 91.124 | 1.00 | 50.34 |
| ATOM | 1020 | CG | ASN | A | 143 | 19.624 | 74.818 | 90.876 | 1.00 | 55.19 |
| ATOM | 1021 | OD1 | ASN | A | 143 | 18.441 | 74.944 | 91.098 | 1.00 | 59.21 |
| ATOM | 1022 | ND2 | ASN | A | 143 | 20.366 | 75.786 | 90.389 | 1.00 | 59.88 |
| ATOM | 1023 | N | GLY | A | 144 | 21.265 | 72.084 | 88.819 | 1.00 | 39.72 |
| ATOM | 1024 | CA | GLY | A | 144 | 22.264 | 71.401 | 87.958 | 1.00 | 26.74 |
| ATOM | 1025 | C | GLY | A | 144 | 21.691 | 70.105 | 87.407 | 1.00 | 21.44 |
| ATOM | 1026 | O | GLY | A | 144 | 22.343 | 69.071 | 87.322 | 1.00 | 25.78 |

【図 2 9】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1027 | N | SER A 145 | 20.380 | 70.181 | 87.105 | 1.00 | 19.15 |
| ATOM | 1028 | CA | SER A 145 | 19.590 | 69.023 | 86.596 | 1.00 | 20.14 |
| ATOM | 1029 | C | SER A 145 | 20.077 | 68.461 | 85.223 | 1.00 | 20.58 |
| ATOM | 1030 | O | SER A 145 | 20.121 | 67.279 | 84.943 | 1.00 | 21.22 |
| ATOM | 1031 | CB | SER A 145 | 18.171 | 69.499 | 86.338 | 1.00 | 18.89 |
| ATOM | 1032 | OG | SER A 145 | 17.219 | 68.526 | 86.712 | 1.00 | 28.02 |
| ATOM | 1033 | N | TYR A 146 | 20.531 | 69.419 | 84.399 | 1.00 | 22.70 |
| ATOM | 1034 | CA | TYR A 146 | 20.867 | 69.170 | 82.968 | 1.00 | 19.51 |
| ATOM | 1035 | C | TYR A 146 | 22.366 | 69.260 | 82.633 | 1.00 | 16.00 |
| ATOM | 1036 | O | TYR A 146 | 22.930 | 70.339 | 82.736 | 1.00 | 17.85 |
| ATOM | 1037 | CB | TYR A 146 | 20.097 | 70.216 | 82.114 | 1.00 | 18.79 |
| ATOM | 1038 | CG | TYR A 146 | 20.211 | 69.933 | 80.600 | 1.00 | 20.29 |
| ATOM | 1039 | CD1 | TYR A 146 | 19.310 | 69.027 | 80.015 | 1.00 | 19.58 |
| ATOM | 1040 | CD2 | TYR A 146 | 21.205 | 70.582 | 79.824 | 1.00 | 20.42 |
| ATOM | 1041 | CE1 | TYR A 146 | 19.389 | 68.781 | 78.631 | 1.00 | 23.13 |
| ATOM | 1042 | CE2 | TYR A 146 | 21.287 | 70.337 | 78.424 | 1.00 | 21.68 |
| ATOM | 1043 | CZ | TYR A 146 | 20.349 | 69.449 | 77.849 | 1.00 | 20.03 |
| ATOM | 1044 | OH | TYR A 146 | 20.320 | 69.236 | 76.483 | 1.00 | 21.40 |
| ATOM | 1045 | N | PRO A 147 | 22.994 | 68.144 | 82.187 | 1.00 | 16.52 |
| ATOM | 1046 | CA | PRO A 147 | 22.385 | 66.793 | 82.188 | 1.00 | 17.87 |
| ATOM | 1047 | C | PRO A 147 | 22.496 | 66.069 | 83.580 | 1.00 | 20.67 |
| ATOM | 1048 | O | PRO A 147 | 23.198 | 66.531 | 84.480 | 1.00 | 22.35 |
| ATOM | 1049 | CB | PRO A 147 | 23.250 | 66.107 | 81.122 | 1.00 | 15.36 |
| ATOM | 1050 | CG | PRO A 147 | 24.649 | 66.716 | 81.297 | 1.00 | 15.06 |
| ATOM | 1051 | CD | PRO A 147 | 24.356 | 68.168 | 81.630 | 1.00 | 16.28 |
| ATOM | 1052 | N | SER A 148 | 21.827 | 64.908 | 83.662 | 1.00 | 18.73 |
| ATOM | 1053 | CA | SER A 148 | 21.951 | 64.019 | 84.823 | 1.00 | 19.51 |
| ATOM | 1054 | C | SER A 148 | 23.269 | 63.281 | 84.930 | 1.00 | 19.93 |
| ATOM | 1055 | O | SER A 148 | 23.601 | 62.439 | 84.108 | 1.00 | 20.09 |
| ATOM | 1056 | CB | SER A 148 | 20.828 | 62.997 | 84.807 | 1.00 | 18.55 |
| ATOM | 1057 | OG | SER A 148 | 20.990 | 61.966 | 85.780 | 1.00 | 19.29 |
| ATOM | 1058 | N | GLY A 149 | 24.036 | 63.618 | 85.972 | 1.00 | 18.26 |
| ATOM | 1059 | CA | GLY A 149 | 25.284 | 62.888 | 86.231 | 1.00 | 16.00 |
| ATOM | 1060 | C | GLY A 149 | 25.096 | 61.411 | 86.577 | 1.00 | 19.38 |
| ATOM | 1061 | O | GLY A 149 | 25.791 | 60.549 | 86.044 | 1.00 | 21.04 |
| ATOM | 1062 | N | HIS A 150 | 24.085 | 61.096 | 87.427 | 1.00 | 20.25 |
| ATOM | 1063 | CA | HIS A 150 | 23.690 | 59.680 | 87.624 | 1.00 | 19.01 |
| ATOM | 1064 | C | HIS A 150 | 23.381 | 58.861 | 86.330 | 1.00 | 19.93 |
| ATOM | 1065 | O | HIS A 150 | 23.833 | 57.725 | 86.145 | 1.00 | 20.78 |
| ATOM | 1066 | CB | HIS A 150 | 22.507 | 59.533 | 88.619 | 1.00 | 18.01 |
| ATOM | 1067 | CG | HIS A 150 | 22.162 | 58.068 | 88.909 | 1.00 | 20.60 |
| ATOM | 1068 | ND1 | HIS A 150 | 22.864 | 57.235 | 89.730 | 1.00 | 23.41 |
| ATOM | 1069 | CD2 | HIS A 150 | 21.117 | 57.313 | 88.374 | 1.00 | 21.91 |
| ATOM | 1070 | CE1 | HIS A 150 | 22.287 | 55.996 | 89.732 | 1.00 | 22.83 |
| ATOM | 1071 | NE2 | HIS A 150 | 21.220 | 56.051 | 88.893 | 1.00 | 24.19 |
| ATOM | 1072 | N | THR A 151 | 22.593 | 59.482 | 85.432 | 1.00 | 18.98 |
| ATOM | 1073 | CA | THR A 151 | 22.325 | 58.814 | 84.132 | 1.00 | 17.17 |
| ATOM | 1074 | C | THR A 151 | 23.548 | 58.652 | 83.228 | 1.00 | 13.61 |
| ATOM | 1075 | O | THR A 151 | 23.814 | 57.594 | 82.659 | 1.00 | 17.00 |
| ATOM | 1076 | CB | THR A 151 | 21.270 | 59.590 | 83.407 | 1.00 | 16.57 |
| ATOM | 1077 | OG1 | THR A 151 | 20.137 | 59.738 | 84.258 | 1.00 | 18.00 |
| ATOM | 1078 | CG2 | THR A 151 | 20.898 | 58.983 | 82.045 | 1.00 | 13.22 |
| ATOM | 1079 | N | SER A 152 | 24.361 | 59.722 | 83.197 | 1.00 | 14.30 |
| ATOM | 1080 | CA | SER A 152 | 25.687 | 59.598 | 82.557 | 1.00 | 15.99 |

【図 3 0】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1081 | C | SER A 152 | 26.575 | 58.446 | 83.029 | 1.00 | 19.72 |
| ATOM | 1082 | O | SER A 152 | 27.086 | 57.628 | 82.255 | 1.00 | 17.38 |
| ATOM | 1083 | CB | SER A 152 | 26.434 | 60.927 | 82.644 | 1.00 | 12.58 |
| ATOM | 1084 | OG | SER A 152 | 27.648 | 60.861 | 81.911 | 1.00 | 16.08 |
| ATOM | 1085 | N | ILE A 153 | 26.662 | 58.340 | 84.403 | 1.00 | 20.60 |
| ATOM | 1086 | CA | ILE A 153 | 27.272 | 57.121 | 85.017 | 1.00 | 16.15 |
| ATOM | 1087 | C | ILE A 153 | 26.622 | 55.802 | 84.631 | 1.00 | 10.76 |
| ATOM | 1088 | O | ILE A 153 | 27.293 | 54.850 | 84.262 | 1.00 | 14.38 |
| ATOM | 1089 | CB | ILE A 153 | 27.384 | 57.170 | 86.608 | 1.00 | 15.02 |
| ATOM | 1090 | CG1 | ILE A 153 | 28.187 | 58.421 | 86.963 | 1.00 | 16.37 |
| ATOM | 1091 | CG2 | ILE A 153 | 28.154 | 55.944 | 87.164 | 1.00 | 12.98 |
| ATOM | 1092 | CD1 | ILE A 153 | 27.870 | 59.034 | 88.338 | 1.00 | 16.58 |
| ATOM | 1093 | N | GLY A 154 | 25.285 | 55.763 | 84.720 | 1.00 | 9.72 |
| ATOM | 1094 | CA | GLY A 154 | 24.662 | 54.476 | 84.397 | 1.00 | 13.63 |
| ATOM | 1095 | C | GLY A 154 | 24.843 | 54.033 | 82.910 | 1.00 | 16.00 |
| ATOM | 1096 | O | GLY A 154 | 25.022 | 52.866 | 82.571 | 1.00 | 16.37 |
| ATOM | 1097 | N | TRP A 155 | 24.801 | 55.047 | 82.025 | 1.00 | 16.77 |
| ATOM | 1098 | CA | TRP A 155 | 24.960 | 54.747 | 80.589 | 1.00 | 16.73 |
| ATOM | 1099 | C | TRP A 155 | 26.378 | 54.351 | 80.200 | 1.00 | 15.90 |
| ATOM | 1100 | O | TRP A 155 | 26.656 | 53.301 | 79.628 | 1.00 | 18.41 |
| ATOM | 1101 | CB | TRP A 155 | 24.442 | 55.940 | 79.771 | 1.00 | 16.52 |
| ATOM | 1102 | CG | TRP A 155 | 24.320 | 55.475 | 78.321 | 1.00 | 19.11 |
| ATOM | 1103 | CD1 | TRP A 155 | 25.009 | 56.015 | 77.210 | 1.00 | 18.94 |
| ATOM | 1104 | CD2 | TRP A 155 | 23.471 | 54.426 | 77.765 | 1.00 | 18.98 |
| ATOM | 1105 | NE1 | TRP A 155 | 24.679 | 55.352 | 76.044 | 1.00 | 17.77 |
| ATOM | 1106 | CE2 | TRP A 155 | 23.781 | 54.322 | 76.357 | 1.00 | 22.22 |
| ATOM | 1107 | CE3 | TRP A 155 | 22.585 | 53.486 | 78.337 | 1.00 | 19.43 |
| ATOM | 1108 | CZ2 | TRP A 155 | 23.084 | 53.377 | 75.564 | 1.00 | 17.99 |
| ATOM | 1109 | CZ3 | TRP A 155 | 21.913 | 52.538 | 77.537 | 1.00 | 19.46 |
| ATOM | 1110 | CH2 | TRP A 155 | 22.191 | 52.464 | 76.158 | 1.00 | 17.84 |
| ATOM | 1111 | N | ALA A 156 | 27.299 | 55.209 | 80.623 | 1.00 | 15.37 |
| ATOM | 1112 | CA | ALA A 156 | 28.702 | 54.836 | 80.515 | 1.00 | 14.36 |
| ATOM | 1113 | C | ALA A 156 | 29.156 | 53.503 | 81.108 | 1.00 | 19.46 |
| ATOM | 1114 | O | ALA A 156 | 29.895 | 52.723 | 80.528 | 1.00 | 19.86 |
| ATOM | 1115 | CB | ALA A 156 | 29.564 | 55.918 | 81.136 | 1.00 | 15.83 |
| ATOM | 1116 | N | THR A 157 | 28.651 | 53.207 | 82.327 | 1.00 | 19.95 |
| ATOM | 1117 | CA | THR A 157 | 28.820 | 51.832 | 82.831 | 1.00 | 17.52 |
| ATOM | 1118 | C | THR A 157 | 28.177 | 50.744 | 81.994 | 1.00 | 15.22 |
| ATOM | 1119 | O | THR A 157 | 28.825 | 49.745 | 81.765 | 1.00 | 19.09 |
| ATOM | 1120 | CB | THR A 157 | 28.328 | 51.667 | 84.291 | 1.00 | 14.92 |
| ATOM | 1121 | OG1 | THR A 157 | 28.932 | 52.679 | 85.054 | 1.00 | 18.29 |
| ATOM | 1122 | CG2 | THR A 157 | 28.620 | 50.327 | 84.944 | 1.00 | 13.21 |
| ATOM | 1123 | N | ALA A 158 | 26.930 | 50.947 | 81.535 | 1.00 | 14.63 |
| ATOM | 1124 | CA | ALA A 158 | 26.365 | 49.936 | 80.621 | 1.00 | 17.10 |
| ATOM | 1125 | C | ALA A 158 | 27.213 | 49.686 | 79.354 | 1.00 | 15.52 |
| ATOM | 1126 | O | ALA A 158 | 27.539 | 48.565 | 79.025 | 1.00 | 16.52 |
| ATOM | 1127 | CB | ALA A 158 | 24.942 | 50.300 | 80.203 | 1.00 | 13.99 |
| ATOM | 1128 | N | LEU A 159 | 27.655 | 50.766 | 78.705 | 1.00 | 17.91 |
| ATOM | 1129 | CA | LEU A 159 | 28.613 | 50.615 | 77.580 | 1.00 | 17.69 |
| ATOM | 1130 | C | LEU A 159 | 29.895 | 49.851 | 77.846 | 1.00 | 19.93 |
| ATOM | 1131 | O | LEU A 159 | 30.277 | 48.954 | 77.092 | 1.00 | 19.21 |
| ATOM | 1132 | CB | LEU A 159 | 28.959 | 51.971 | 76.939 | 1.00 | 14.08 |
| ATOM | 1133 | CG | LEU A 159 | 27.744 | 52.759 | 76.396 | 1.00 | 11.97 |
| ATOM | 1134 | CD1 | LEU A 159 | 27.045 | 52.105 | 75.210 | 1.00 | 12.90 |

【図 3 1】

| | | | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----|---|-----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1135 | CD2 | LEU | A | 159 | 28.177 | 54.158 | 76.046 | 1.00 | 12.40 |
| ATOM | 1136 | N | VAL | A | 160 | 30.547 | 50.181 | 79.014 | 1.00 | 21.70 |
| ATOM | 1137 | CA | VAL | A | 160 | 31.713 | 49.315 | 79.310 | 1.00 | 20.85 |
| ATOM | 1138 | C | VAL | A | 160 | 31.429 | 47.877 | 79.767 | 1.00 | 21.33 |
| ATOM | 1139 | O | VAL | A | 160 | 32.086 | 46.918 | 79.409 | 1.00 | 20.74 |
| ATOM | 1140 | CB | VAL | A | 160 | 32.574 | 50.032 | 80.367 | 1.00 | 21.59 |
| ATOM | 1141 | CG1 | VAL | A | 160 | 33.518 | 49.143 | 81.174 | 1.00 | 20.11 |
| ATOM | 1142 | CG2 | VAL | A | 160 | 33.299 | 51.307 | 79.977 | 1.00 | 20.10 |
| ATOM | 1143 | N | LEU | A | 161 | 30.351 | 47.711 | 80.542 | 1.00 | 21.86 |
| ATOM | 1144 | CA | LEU | A | 161 | 29.850 | 46.366 | 80.838 | 1.00 | 20.50 |
| ATOM | 1145 | C | LEU | A | 161 | 29.462 | 45.490 | 79.613 | 1.00 | 23.16 |
| ATOM | 1146 | O | LEU | A | 161 | 29.753 | 44.294 | 79.564 | 1.00 | 22.89 |
| ATOM | 1147 | CB | LEU | A | 161 | 28.623 | 46.472 | 81.733 | 1.00 | 18.65 |
| ATOM | 1148 | CG | LEU | A | 161 | 28.685 | 46.438 | 83.262 | 1.00 | 20.99 |
| ATOM | 1149 | CD1 | LEU | A | 161 | 27.473 | 46.378 | 84.194 | 1.00 | 21.43 |
| ATOM | 1150 | CD2 | LEU | A | 161 | 29.729 | 45.492 | 83.855 | 1.00 | 19.30 |
| ATOM | 1151 | N | ALA | A | 162 | 28.755 | 46.146 | 78.648 | 1.00 | 21.20 |
| ATOM | 1152 | CA | ALA | A | 162 | 28.384 | 45.496 | 77.361 | 1.00 | 19.14 |
| ATOM | 1153 | C | ALA | A | 162 | 29.591 | 44.948 | 76.586 | 1.00 | 17.15 |
| ATOM | 1154 | O | ALA | A | 162 | 29.620 | 43.812 | 76.133 | 1.00 | 20.85 |
| ATOM | 1155 | CB | ALA | A | 162 | 27.581 | 46.464 | 76.500 | 1.00 | 17.38 |
| ATOM | 1156 | N | GLU | A | 163 | 30.663 | 45.745 | 76.603 | 1.00 | 14.74 |
| ATOM | 1157 | CA | GLU | A | 163 | 31.962 | 45.262 | 76.118 | 1.00 | 17.48 |
| ATOM | 1158 | C | GLU | A | 163 | 32.648 | 44.080 | 76.824 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 1159 | O | GLU | A | 163 | 33.271 | 43.216 | 76.227 | 1.00 | 23.96 |
| ATOM | 1160 | CB | GLU | A | 163 | 32.915 | 46.448 | 76.000 | 1.00 | 13.52 |
| ATOM | 1161 | CG | GLU | A | 163 | 34.227 | 46.018 | 75.359 | 1.00 | 13.04 |
| ATOM | 1162 | CD | GLU | A | 163 | 35.240 | 47.119 | 75.338 | 1.00 | 15.88 |
| ATOM | 1163 | OE1 | GLU | A | 163 | 36.427 | 46.814 | 75.269 | 1.00 | 19.78 |
| ATOM | 1164 | OE2 | GLU | A | 163 | 34.873 | 48.290 | 75.377 | 1.00 | 20.10 |
| ATOM | 1165 | N | ILE | A | 164 | 32.504 | 44.039 | 78.153 | 1.00 | 20.17 |
| ATOM | 1166 | CA | ILE | A | 164 | 32.996 | 42.869 | 78.905 | 1.00 | 18.72 |
| ATOM | 1167 | C | ILE | A | 164 | 32.164 | 41.609 | 78.757 | 1.00 | 17.39 |
| ATOM | 1168 | O | ILE | A | 164 | 32.635 | 40.481 | 78.674 | 1.00 | 20.44 |
| ATOM | 1169 | CB | ILE | A | 164 | 33.132 | 43.293 | 80.382 | 1.00 | 20.67 |
| ATOM | 1170 | CG1 | ILE | A | 164 | 34.222 | 44.361 | 80.452 | 1.00 | 18.83 |
| ATOM | 1171 | CG2 | ILE | A | 164 | 33.398 | 42.110 | 81.345 | 1.00 | 20.70 |
| ATOM | 1172 | CD1 | ILE | A | 164 | 34.144 | 45.084 | 81.793 | 1.00 | 21.31 |
| ATOM | 1173 | N | ASN | A | 165 | 30.869 | 41.846 | 78.704 | 1.00 | 18.41 |
| ATOM | 1174 | CA | ASN | A | 165 | 29.979 | 40.712 | 78.524 | 1.00 | 21.36 |
| ATOM | 1175 | C | ASN | A | 165 | 28.957 | 40.867 | 77.375 | 1.00 | 23.74 |
| ATOM | 1176 | O | ASN | A | 165 | 27.753 | 40.988 | 77.563 | 1.00 | 23.14 |
| ATOM | 1177 | CB | ASN | A | 165 | 29.324 | 40.404 | 79.878 | 1.00 | 21.69 |
| ATOM | 1178 | CG | ASN | A | 165 | 28.471 | 39.156 | 79.861 | 1.00 | 25.72 |
| ATOM | 1179 | OD1 | ASN | A | 165 | 28.469 | 38.307 | 78.967 | 1.00 | 29.37 |
| ATOM | 1180 | ND2 | ASN | A | 165 | 27.730 | 39.051 | 80.951 | 1.00 | 27.39 |
| ATOM | 1181 | N | PRO | A | 166 | 29.466 | 40.814 | 76.118 | 1.00 | 25.93 |
| ATOM | 1182 | CA | PRO | A | 166 | 28.556 | 40.971 | 74.957 | 1.00 | 26.27 |
| ATOM | 1183 | C | PRO | A | 166 | 27.447 | 39.924 | 74.837 | 1.00 | 24.06 |
| ATOM | 1184 | O | PRO | A | 166 | 26.361 | 40.184 | 74.360 | 1.00 | 24.11 |
| ATOM | 1185 | CB | PRO | A | 166 | 29.517 | 41.040 | 73.781 | 1.00 | 25.15 |
| ATOM | 1186 | CG | PRO | A | 166 | 30.731 | 40.254 | 74.255 | 1.00 | 27.68 |
| ATOM | 1187 | CD | PRO | A | 166 | 30.849 | 40.613 | 75.728 | 1.00 | 24.89 |
| ATOM | 1188 | N | GLN | A | 167 | 27.679 | 38.741 | 75.385 | 1.00 | 25.15 |

【図 3 2】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1189 | CA | GLN A 167 | 26.552 | 37.804 | 75.508 | 1.00 | 27.09 |
| ATOM | 1190 | C | GLN A 167 | 25.275 | 38.321 | 76.189 | 1.00 | 25.06 |
| ATOM | 1191 | O | GLN A 167 | 24.162 | 37.932 | 75.883 | 1.00 | 23.75 |
| ATOM | 1192 | CB | GLN A 167 | 27.080 | 36.617 | 76.282 | 1.00 | 35.50 |
| ATOM | 1193 | CG | GLN A 167 | 27.386 | 35.380 | 75.468 | 1.00 | 52.12 |
| ATOM | 1194 | CD | GLN A 167 | 26.074 | 34.747 | 75.000 | 1.00 | 65.78 |
| ATOM | 1195 | OE1 | GLN A 167 | 25.950 | 34.245 | 73.889 | 1.00 | 72.02 |
| ATOM | 1196 | NE2 | GLN A 167 | 25.047 | 34.780 | 75.867 | 1.00 | 71.50 |
| ATOM | 1197 | N | ARG A 168 | 25.513 | 39.242 | 77.156 | 1.00 | 26.04 |
| ATOM | 1198 | CA | ARG A 168 | 24.389 | 39.900 | 77.837 | 1.00 | 25.63 |
| ATOM | 1199 | C | ARG A 168 | 24.242 | 41.368 | 77.558 | 1.00 | 23.88 |
| ATOM | 1200 | O | ARG A 168 | 23.632 | 42.106 | 78.308 | 1.00 | 24.09 |
| ATOM | 1201 | CB | ARG A 168 | 24.452 | 39.638 | 79.337 | 1.00 | 24.63 |
| ATOM | 1202 | CG | ARG A 168 | 24.087 | 38.171 | 79.408 | 1.00 | 25.72 |
| ATOM | 1203 | CD | ARG A 168 | 23.986 | 37.617 | 80.802 | 1.00 | 33.72 |
| ATOM | 1204 | NE | ARG A 168 | 22.970 | 38.302 | 81.587 | 1.00 | 35.38 |
| ATOM | 1205 | CZ | ARG A 168 | 21.729 | 37.877 | 81.680 | 1.00 | 35.91 |
| ATOM | 1206 | NH1 | ARG A 168 | 20.908 | 38.482 | 82.490 | 1.00 | 34.99 |
| ATOM | 1207 | NH2 | ARG A 168 | 21.314 | 36.867 | 80.975 | 1.00 | 39.28 |
| ATOM | 1208 | N | GLN A 169 | 24.838 | 41.810 | 76.424 | 1.00 | 23.22 |
| ATOM | 1209 | CA | GLN A 169 | 24.820 | 43.228 | 76.080 | 1.00 | 19.99 |
| ATOM | 1210 | C | GLN A 169 | 23.441 | 43.850 | 76.067 | 1.00 | 21.38 |
| ATOM | 1211 | O | GLN A 169 | 23.216 | 44.969 | 76.492 | 1.00 | 24.60 |
| ATOM | 1212 | CB | GLN A 169 | 25.571 | 43.510 | 74.769 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 1213 | CG | GLN A 169 | 24.970 | 42.878 | 73.494 | 1.00 | 20.93 |
| ATOM | 1214 | CD | GLN A 169 | 25.716 | 43.287 | 72.207 | 1.00 | 23.42 |
| ATOM | 1215 | OE1 | GLN A 169 | 26.680 | 44.055 | 72.202 | 1.00 | 24.82 |
| ATOM | 1216 | NE2 | GLN A 169 | 25.186 | 42.738 | 71.109 | 1.00 | 13.86 |
| ATOM | 1217 | N | ASN A 170 | 22.455 | 43.089 | 75.600 | 1.00 | 20.48 |
| ATOM | 1218 | CA | ASN A 170 | 21.138 | 43.736 | 75.525 | 1.00 | 20.97 |
| ATOM | 1219 | C | ASN A 170 | 20.484 | 44.007 | 76.892 | 1.00 | 19.73 |
| ATOM | 1220 | O | ASN A 170 | 19.852 | 45.020 | 77.128 | 1.00 | 18.90 |
| ATOM | 1221 | CB | ASN A 170 | 20.195 | 42.930 | 74.595 | 1.00 | 24.43 |
| ATOM | 1222 | CG | ASN A 170 | 20.763 | 42.881 | 73.153 | 1.00 | 25.82 |
| ATOM | 1223 | OD1 | ASN A 170 | 20.842 | 43.862 | 72.440 | 1.00 | 26.22 |
| ATOM | 1224 | ND2 | ASN A 170 | 21.197 | 41.709 | 72.734 | 1.00 | 25.47 |
| ATOM | 1225 | N | GLU A 171 | 20.680 | 43.042 | 77.790 | 1.00 | 21.27 |
| ATOM | 1226 | CA | GLU A 171 | 20.166 | 43.146 | 79.157 | 1.00 | 19.84 |
| ATOM | 1227 | C | GLU A 171 | 20.849 | 44.220 | 79.926 | 1.00 | 16.23 |
| ATOM | 1228 | O | GLU A 171 | 20.199 | 45.026 | 80.575 | 1.00 | 20.87 |
| ATOM | 1229 | CB | GLU A 171 | 20.317 | 41.822 | 79.892 | 1.00 | 20.47 |
| ATOM | 1230 | CG | GLU A 171 | 19.412 | 40.750 | 79.312 | 1.00 | 24.15 |
| ATOM | 1231 | CD | GLU A 171 | 20.157 | 39.825 | 78.376 | 1.00 | 26.37 |
| ATOM | 1232 | OE1 | GLU A 171 | 21.076 | 40.256 | 77.685 | 1.00 | 23.54 |
| ATOM | 1233 | OE2 | GLU A 171 | 19.801 | 38.645 | 78.363 | 1.00 | 32.14 |
| ATOM | 1234 | N | ILE A 172 | 22.169 | 44.236 | 79.751 | 1.00 | 17.53 |
| ATOM | 1235 | CA | ILE A 172 | 23.029 | 45.318 | 80.257 | 1.00 | 16.90 |
| ATOM | 1236 | C | ILE A 172 | 22.679 | 46.733 | 79.813 | 1.00 | 20.21 |
| ATOM | 1237 | O | ILE A 172 | 22.454 | 47.636 | 80.617 | 1.00 | 18.91 |
| ATOM | 1238 | CB | ILE A 172 | 24.507 | 44.992 | 79.956 | 1.00 | 17.00 |
| ATOM | 1239 | CG1 | ILE A 172 | 25.000 | 43.685 | 80.613 | 1.00 | 15.78 |
| ATOM | 1240 | CG2 | ILE A 172 | 25.426 | 46.163 | 80.300 | 1.00 | 18.13 |
| ATOM | 1241 | CD1 | ILE A 172 | 26.426 | 43.320 | 80.163 | 1.00 | 13.83 |
| ATOM | 1242 | N | LEU A 173 | 22.575 | 46.909 | 78.468 | 1.00 | 20.75 |

【図 3 3】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1243 | CA | LEU A 173 | 22.107 | 48.206 | 77.946 | 1.00 | 17.70 |
| ATOM | 1244 | C | LEU A 173 | 20.699 | 48.622 | 78.396 | 1.00 | 16.26 |
| ATOM | 1245 | O | LEU A 173 | 20.376 | 49.774 | 78.663 | 1.00 | 18.18 |
| ATOM | 1246 | CB | LEU A 173 | 22.176 | 48.201 | 76.419 | 1.00 | 16.81 |
| ATOM | 1247 | CG | LEU A 173 | 23.600 | 48.021 | 75.966 | 1.00 | 18.73 |
| ATOM | 1248 | CD1 | LEU A 173 | 24.410 | 49.282 | 76.138 | 1.00 | 16.97 |
| ATOM | 1249 | CD2 | LEU A 173 | 23.619 | 47.550 | 74.505 | 1.00 | 23.91 |
| ATOM | 1250 | N | LYS A 174 | 19.835 | 47.625 | 78.475 | 1.00 | 15.86 |
| ATOM | 1251 | CA | LYS A 174 | 18.494 | 47.970 | 78.945 | 1.00 | 19.21 |
| ATOM | 1252 | C | LYS A 174 | 18.453 | 48.415 | 80.429 | 1.00 | 21.86 |
| ATOM | 1253 | O | LYS A 174 | 17.800 | 49.404 | 80.737 | 1.00 | 20.00 |
| ATOM | 1254 | CB | LYS A 174 | 17.577 | 46.773 | 78.700 | 1.00 | 20.19 |
| ATOM | 1255 | CG | LYS A 174 | 16.094 | 47.130 | 78.731 | 1.00 | 27.84 |
| ATOM | 1256 | CD | LYS A 174 | 15.799 | 48.368 | 77.858 | 1.00 | 36.14 |
| ATOM | 1257 | CE | LYS A 174 | 14.309 | 48.628 | 77.774 | 1.00 | 40.56 |
| ATOM | 1258 | NZ | LYS A 174 | 13.775 | 48.622 | 79.156 | 1.00 | 49.45 |
| ATOM | 1259 | N | ARG A 175 | 19.250 | 47.698 | 81.286 | 1.00 | 21.93 |
| ATOM | 1260 | CA | ARG A 175 | 19.476 | 48.145 | 82.686 | 1.00 | 19.65 |
| ATOM | 1261 | C | ARG A 175 | 20.037 | 49.561 | 82.807 | 1.00 | 16.70 |
| ATOM | 1262 | O | ARG A 175 | 19.476 | 50.419 | 83.468 | 1.00 | 18.12 |
| ATOM | 1263 | CB | ARG A 175 | 20.345 | 47.126 | 83.467 | 1.00 | 21.25 |
| ATOM | 1264 | CG | ARG A 175 | 20.608 | 47.477 | 84.954 | 1.00 | 22.00 |
| ATOM | 1265 | CD | ARG A 175 | 19.259 | 47.669 | 85.656 | 1.00 | 25.63 |
| ATOM | 1266 | NE | ARG A 175 | 19.435 | 47.923 | 87.095 | 1.00 | 29.77 |
| ATOM | 1267 | CZ | ARG A 175 | 18.601 | 48.672 | 87.834 | 1.00 | 27.58 |
| ATOM | 1268 | NH1 | ARG A 175 | 17.550 | 49.301 | 87.355 | 1.00 | 24.74 |
| ATOM | 1269 | NH2 | ARG A 175 | 18.792 | 48.780 | 89.073 | 1.00 | 27.45 |
| ATOM | 1270 | N | GLY A 176 | 21.122 | 49.800 | 82.048 | 1.00 | 17.53 |
| ATOM | 1271 | CA | GLY A 176 | 21.698 | 51.143 | 81.893 | 1.00 | 17.18 |
| ATOM | 1272 | C | GLY A 176 | 20.679 | 52.214 | 81.552 | 1.00 | 21.18 |
| ATOM | 1273 | O | GLY A 176 | 20.582 | 53.278 | 82.149 | 1.00 | 21.85 |
| ATOM | 1274 | N | TYR A 177 | 19.847 | 51.887 | 80.547 | 1.00 | 22.48 |
| ATOM | 1275 | CA | TYR A 177 | 18.756 | 52.787 | 80.117 | 1.00 | 20.51 |
| ATOM | 1276 | C | TYR A 177 | 17.754 | 53.106 | 81.242 | 1.00 | 18.92 |
| ATOM | 1277 | O | TYR A 177 | 17.406 | 54.246 | 81.542 | 1.00 | 15.84 |
| ATOM | 1278 | CB | TYR A 177 | 18.007 | 52.120 | 78.939 | 1.00 | 23.76 |
| ATOM | 1279 | CG | TYR A 177 | 17.210 | 53.131 | 78.177 | 1.00 | 24.47 |
| ATOM | 1280 | CD1 | TYR A 177 | 15.817 | 53.306 | 78.397 | 1.00 | 26.61 |
| ATOM | 1281 | CD2 | TYR A 177 | 17.941 | 53.869 | 77.236 | 1.00 | 29.40 |
| ATOM | 1282 | CE1 | TYR A 177 | 15.139 | 54.308 | 77.661 | 1.00 | 29.08 |
| ATOM | 1283 | CE2 | TYR A 177 | 17.270 | 54.855 | 76.515 | 1.00 | 30.70 |
| ATOM | 1284 | CZ | TYR A 177 | 15.899 | 55.092 | 76.747 | 1.00 | 32.01 |
| ATOM | 1285 | OH | TYR A 177 | 15.401 | 56.167 | 76.020 | 1.00 | 41.52 |
| ATOM | 1286 | N | GLU A 178 | 17.354 | 52.008 | 81.867 | 1.00 | 19.45 |
| ATOM | 1287 | CA | GLU A 178 | 16.429 | 52.094 | 82.972 | 1.00 | 22.02 |
| ATOM | 1288 | C | GLU A 178 | 16.820 | 52.802 | 84.236 | 1.00 | 20.09 |
| ATOM | 1289 | O | GLU A 178 | 16.001 | 53.492 | 84.805 | 1.00 | 21.41 |
| ATOM | 1290 | CB | GLU A 178 | 16.010 | 50.731 | 83.357 | 1.00 | 25.45 |
| ATOM | 1291 | CG | GLU A 178 | 15.173 | 50.032 | 82.303 | 1.00 | 34.73 |
| ATOM | 1292 | CD | GLU A 178 | 13.893 | 50.810 | 81.951 | 1.00 | 40.36 |
| ATOM | 1293 | OE1 | GLU A 178 | 13.432 | 51.667 | 82.707 | 1.00 | 33.51 |
| ATOM | 1294 | OE2 | GLU A 178 | 13.352 | 50.556 | 80.876 | 1.00 | 45.77 |
| ATOM | 1295 | N | LEU A 179 | 18.090 | 52.695 | 84.609 | 1.00 | 19.63 |
| ATOM | 1296 | CA | LEU A 179 | 18.655 | 53.567 | 85.665 | 1.00 | 19.10 |

【図 3 4】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1297 | C | LEU A 179 | 18.366 | 55.051 | 85.511 | 1.00 | 20.25 |
| ATOM | 1298 | O | LEU A 179 | 17.838 | 55.726 | 86.374 | 1.00 | 19.26 |
| ATOM | 1299 | CB | LEU A 179 | 20.178 | 53.361 | 85.813 | 1.00 | 17.45 |
| ATOM | 1300 | CG | LEU A 179 | 20.610 | 52.013 | 86.426 | 1.00 | 18.23 |
| ATOM | 1301 | CD1 | LEU A 179 | 20.093 | 51.829 | 87.873 | 1.00 | 16.98 |
| ATOM | 1302 | CD2 | LEU A 179 | 22.124 | 51.811 | 86.340 | 1.00 | 16.34 |
| ATOM | 1303 | N | GLY A 180 | 18.647 | 55.545 | 84.290 | 1.00 | 19.84 |
| ATOM | 1304 | CA | GLY A 180 | 18.171 | 56.903 | 83.987 | 1.00 | 15.90 |
| ATOM | 1305 | C | GLY A 180 | 16.655 | 57.072 | 84.027 | 1.00 | 17.05 |
| ATOM | 1306 | O | GLY A 180 | 16.130 | 58.031 | 84.564 | 1.00 | 19.49 |
| ATOM | 1307 | N | GLN A 181 | 15.923 | 56.068 | 83.478 | 1.00 | 18.19 |
| ATOM | 1308 | CA | GLN A 181 | 14.448 | 56.207 | 83.522 | 1.00 | 17.92 |
| ATOM | 1309 | C | GLN A 181 | 13.822 | 56.265 | 84.938 | 1.00 | 18.20 |
| ATOM | 1310 | O | GLN A 181 | 12.903 | 57.008 | 85.258 | 1.00 | 19.66 |
| ATOM | 1311 | CB | GLN A 181 | 13.716 | 55.189 | 82.620 | 1.00 | 15.39 |
| ATOM | 1312 | CG | GLN A 181 | 13.936 | 55.324 | 81.073 | 1.00 | 15.18 |
| ATOM | 1313 | CD | GLN A 181 | 13.823 | 56.763 | 80.634 | 1.00 | 13.30 |
| ATOM | 1314 | OE1 | GLN A 181 | 14.769 | 57.400 | 80.176 | 1.00 | 17.23 |
| ATOM | 1315 | NE2 | GLN A 181 | 12.626 | 57.300 | 80.812 | 1.00 | 12.82 |
| ATOM | 1316 | N | SER A 182 | 14.440 | 55.497 | 85.821 | 1.00 | 20.03 |
| ATOM | 1317 | CA | SER A 182 | 14.156 | 55.600 | 87.273 | 1.00 | 16.56 |
| ATOM | 1318 | C | SER A 182 | 14.209 | 56.973 | 87.871 | 1.00 | 14.78 |
| ATOM | 1319 | O | SER A 182 | 13.305 | 57.369 | 88.582 | 1.00 | 19.49 |
| ATOM | 1320 | CB | SER A 182 | 15.056 | 54.630 | 88.021 | 1.00 | 15.31 |
| ATOM | 1321 | OG | SER A 182 | 14.563 | 53.332 | 87.714 | 1.00 | 16.70 |
| ATOM | 1322 | N | ARG A 183 | 15.246 | 57.738 | 87.523 | 1.00 | 16.99 |
| ATOM | 1323 | CA | ARG A 183 | 15.289 | 59.169 | 87.858 | 1.00 | 15.54 |
| ATOM | 1324 | C | ARG A 183 | 14.161 | 60.085 | 87.309 | 1.00 | 19.55 |
| ATOM | 1325 | O | ARG A 183 | 13.693 | 61.039 | 87.956 | 1.00 | 17.04 |
| ATOM | 1326 | CB | ARG A 183 | 16.661 | 59.785 | 87.569 | 1.00 | 14.08 |
| ATOM | 1327 | CG | ARG A 183 | 17.811 | 59.024 | 88.265 | 1.00 | 19.49 |
| ATOM | 1328 | CD | ARG A 183 | 17.716 | 59.007 | 89.816 | 1.00 | 21.46 |
| ATOM | 1329 | NE | ARG A 183 | 18.519 | 57.930 | 90.434 | 1.00 | 22.16 |
| ATOM | 1330 | CZ | ARG A 183 | 19.509 | 58.121 | 91.300 | 1.00 | 19.15 |
| ATOM | 1331 | NH1 | ARG A 183 | 19.913 | 59.335 | 91.541 | 1.00 | 16.50 |
| ATOM | 1332 | NH2 | ARG A 183 | 20.042 | 57.081 | 91.914 | 1.00 | 18.34 |
| ATOM | 1333 | N | VAL A 184 | 13.681 | 59.704 | 86.076 | 1.00 | 21.38 |
| ATOM | 1334 | CA | VAL A 184 | 12.494 | 60.417 | 85.589 | 1.00 | 19.02 |
| ATOM | 1335 | C | VAL A 184 | 11.194 | 60.051 | 86.301 | 1.00 | 16.98 |
| ATOM | 1336 | O | VAL A 184 | 10.468 | 60.913 | 86.800 | 1.00 | 18.45 |
| ATOM | 1337 | CB | VAL A 184 | 12.368 | 60.194 | 84.070 | 1.00 | 19.28 |
| ATOM | 1338 | CG1 | VAL A 184 | 11.057 | 60.717 | 83.486 | 1.00 | 17.84 |
| ATOM | 1339 | CG2 | VAL A 184 | 13.517 | 60.605 | 83.169 | 1.00 | 15.69 |
| ATOM | 1340 | N | ILE A 185 | 10.977 | 58.734 | 86.408 | 1.00 | 17.32 |
| ATOM | 1341 | CA | ILE A 185 | 9.834 | 58.241 | 87.202 | 1.00 | 21.14 |
| ATOM | 1342 | C | ILE A 185 | 9.790 | 58.797 | 88.672 | 1.00 | 22.77 |
| ATOM | 1343 | O | ILE A 185 | 8.749 | 59.230 | 89.142 | 1.00 | 22.95 |
| ATOM | 1344 | CB | ILE A 185 | 9.810 | 56.695 | 87.193 | 1.00 | 20.65 |
| ATOM | 1345 | CG1 | ILE A 185 | 9.555 | 56.195 | 85.758 | 1.00 | 18.43 |
| ATOM | 1346 | CG2 | ILE A 185 | 8.776 | 56.133 | 88.202 | 1.00 | 18.29 |
| ATOM | 1347 | CD1 | ILE A 185 | 9.914 | 54.734 | 85.494 | 1.00 | 14.60 |
| ATOM | 1348 | N | CYS A 186 | 10.976 | 58.837 | 89.332 | 1.00 | 20.34 |
| ATOM | 1349 | CA | CYS A 186 | 11.005 | 59.262 | 90.745 | 1.00 | 21.26 |
| ATOM | 1350 | C | CYS A 186 | 10.979 | 60.766 | 90.931 | 1.00 | 22.80 |

【図 3 5】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1351 | O | CYS A 186 | 10.775 | 61.304 | 92.009 | 1.00 | 23.98 |
| ATOM | 1352 | CB | CYS A 186 | 12.220 | 58.669 | 91.429 | 1.00 | 21.60 |
| ATOM | 1353 | SG | CYS A 186 | 12.075 | 58.576 | 93.237 | 1.00 | 25.16 |
| ATOM | 1354 | N | GLY A 187 | 11.149 | 61.494 | 89.814 | 1.00 | 20.34 |
| ATOM | 1355 | CA | GLY A 187 | 11.023 | 62.949 | 89.981 | 1.00 | 13.75 |
| ATOM | 1356 | C | GLY A 187 | 12.351 | 63.676 | 90.197 | 1.00 | 14.55 |
| ATOM | 1357 | O | GLY A 187 | 12.436 | 64.871 | 90.453 | 1.00 | 16.08 |
| ATOM | 1358 | N | TYR A 188 | 13.434 | 62.894 | 90.072 | 1.00 | 14.86 |
| ATOM | 1359 | CA | TYR A 188 | 14.736 | 63.526 | 90.226 | 1.00 | 16.85 |
| ATOM | 1360 | C | TYR A 188 | 15.214 | 64.366 | 89.046 | 1.00 | 20.24 |
| ATOM | 1361 | O | TYR A 188 | 15.979 | 65.318 | 89.192 | 1.00 | 18.42 |
| ATOM | 1362 | CB | TYR A 188 | 15.758 | 62.441 | 90.479 | 1.00 | 21.64 |
| ATOM | 1363 | CG | TYR A 188 | 15.683 | 61.913 | 91.899 | 1.00 | 27.20 |
| ATOM | 1364 | CD1 | TYR A 188 | 16.748 | 62.226 | 92.737 | 1.00 | 32.00 |
| ATOM | 1365 | CD2 | TYR A 188 | 14.604 | 61.128 | 92.365 | 1.00 | 30.81 |
| ATOM | 1366 | CE1 | TYR A 188 | 16.727 | 61.784 | 94.071 | 1.00 | 35.38 |
| ATOM | 1367 | CE2 | TYR A 188 | 14.570 | 60.695 | 93.705 | 1.00 | 30.65 |
| ATOM | 1368 | CZ | TYR A 188 | 15.624 | 61.071 | 94.556 | 1.00 | 35.88 |
| ATOM | 1369 | OH | TYR A 188 | 15.607 | 60.787 | 95.912 | 1.00 | 41.39 |
| ATOM | 1370 | N | HIS A 189 | 14.751 | 63.890 | 87.862 | 1.00 | 19.35 |
| ATOM | 1371 | CA | HIS A 189 | 15.215 | 64.475 | 86.589 | 1.00 | 19.83 |
| ATOM | 1372 | C | HIS A 189 | 14.108 | 64.550 | 85.551 | 1.00 | 16.85 |
| ATOM | 1373 | O | HIS A 189 | 13.232 | 63.689 | 85.533 | 1.00 | 18.10 |
| ATOM | 1374 | CB | HIS A 189 | 16.360 | 63.648 | 86.032 | 1.00 | 15.43 |
| ATOM | 1375 | CG | HIS A 189 | 17.677 | 64.142 | 86.589 | 1.00 | 16.05 |
| ATOM | 1376 | ND1 | HIS A 189 | 18.154 | 65.384 | 86.414 | 1.00 | 17.24 |
| ATOM | 1377 | CD2 | HIS A 189 | 18.581 | 63.433 | 87.382 | 1.00 | 17.58 |
| ATOM | 1378 | CE1 | HIS A 189 | 19.347 | 65.503 | 87.080 | 1.00 | 16.38 |
| ATOM | 1379 | NE2 | HIS A 189 | 19.587 | 64.304 | 87.667 | 1.00 | 18.68 |
| ATOM | 1380 | N | TRP A 190 | 14.183 | 65.611 | 84.723 | 1.00 | 18.99 |
| ATOM | 1381 | CA | TRP A 190 | 13.341 | 65.719 | 83.490 | 1.00 | 17.22 |
| ATOM | 1382 | C | TRP A 190 | 13.768 | 64.690 | 82.453 | 1.00 | 15.79 |
| ATOM | 1383 | O | TRP A 190 | 14.942 | 64.354 | 82.416 | 1.00 | 15.77 |
| ATOM | 1384 | CB | TRP A 190 | 13.502 | 67.102 | 82.855 | 1.00 | 16.12 |
| ATOM | 1385 | CG | TRP A 190 | 13.134 | 68.178 | 83.857 | 1.00 | 12.39 |
| ATOM | 1386 | CD1 | TRP A 190 | 14.033 | 69.073 | 84.454 | 1.00 | 10.88 |
| ATOM | 1387 | CD2 | TRP A 190 | 11.800 | 68.581 | 84.295 | 1.00 | 14.35 |
| ATOM | 1388 | NE1 | TRP A 190 | 13.343 | 69.989 | 85.186 | 1.00 | 13.77 |
| ATOM | 1389 | CE2 | TRP A 190 | 11.976 | 69.731 | 85.141 | 1.00 | 10.71 |
| ATOM | 1390 | CE3 | TRP A 190 | 10.505 | 68.036 | 84.094 | 1.00 | 14.68 |
| ATOM | 1391 | CZ2 | TRP A 190 | 10.845 | 70.401 | 85.666 | 1.00 | 12.89 |
| ATOM | 1392 | CZ3 | TRP A 190 | 9.393 | 68.700 | 84.672 | 1.00 | 16.93 |
| ATOM | 1393 | CH2 | TRP A 190 | 9.557 | 69.875 | 85.441 | 1.00 | 12.82 |
| ATOM | 1394 | N | GLN A 191 | 12.859 | 64.188 | 81.613 | 1.00 | 16.92 |
| ATOM | 1395 | CA | GLN A 191 | 13.316 | 63.234 | 80.569 | 1.00 | 17.49 |
| ATOM | 1396 | C | GLN A 191 | 14.519 | 63.720 | 79.696 | 1.00 | 15.64 |
| ATOM | 1397 | O | GLN A 191 | 15.508 | 63.054 | 79.429 | 1.00 | 16.52 |
| ATOM | 1398 | CB | GLN A 191 | 12.113 | 62.829 | 79.721 | 1.00 | 15.28 |
| ATOM | 1399 | CG | GLN A 191 | 12.522 | 61.832 | 78.632 | 1.00 | 17.26 |
| ATOM | 1400 | CD | GLN A 191 | 12.860 | 60.493 | 79.206 | 1.00 | 16.84 |
| ATOM | 1401 | OE1 | GLN A 191 | 12.086 | 59.920 | 79.946 | 1.00 | 21.21 |
| ATOM | 1402 | NE2 | GLN A 191 | 14.027 | 59.971 | 78.864 | 1.00 | 16.69 |
| ATOM | 1403 | N | SER A 192 | 14.448 | 65.016 | 79.389 | 1.00 | 17.04 |
| ATOM | 1404 | CA | SER A 192 | 15.564 | 65.622 | 78.666 | 1.00 | 15.81 |

【図 3 6】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1405 | C | SER A 192 | 16.899 | 65.683 | 79.339 | 1.00 | 17.61 |
| ATOM | 1406 | O | SER A 192 | 17.937 | 65.640 | 78.700 | 1.00 | 16.65 |
| ATOM | 1407 | CB | SER A 192 | 15.209 | 67.005 | 78.211 | 1.00 | 15.87 |
| ATOM | 1408 | OG | SER A 192 | 14.862 | 67.833 | 79.313 | 1.00 | 21.12 |
| ATOM | 1409 | N | ASP A 193 | 16.886 | 65.712 | 80.681 | 1.00 | 17.44 |
| ATOM | 1410 | CA | ASP A 193 | 18.190 | 65.648 | 81.360 | 1.00 | 15.23 |
| ATOM | 1411 | C | ASP A 193 | 18.889 | 64.316 | 81.197 | 1.00 | 12.26 |
| ATOM | 1412 | O | ASP A 193 | 20.113 | 64.204 | 81.054 | 1.00 | 14.16 |
| ATOM | 1413 | CB | ASP A 193 | 18.036 | 65.832 | 82.887 | 1.00 | 16.01 |
| ATOM | 1414 | CG | ASP A 193 | 17.367 | 67.116 | 83.311 | 1.00 | 14.57 |
| ATOM | 1415 | OD1 | ASP A 193 | 17.503 | 68.180 | 82.691 | 1.00 | 15.89 |
| ATOM | 1416 | OD2 | ASP A 193 | 16.673 | 67.038 | 84.312 | 1.00 | 19.14 |
| ATOM | 1417 | N | VAL A 194 | 18.025 | 63.283 | 81.216 | 1.00 | 11.48 |
| ATOM | 1418 | CA | VAL A 194 | 18.425 | 61.882 | 81.108 | 1.00 | 13.18 |
| ATOM | 1419 | C | VAL A 194 | 18.851 | 61.478 | 79.663 | 1.00 | 15.63 |
| ATOM | 1420 | O | VAL A 194 | 19.852 | 60.822 | 79.387 | 1.00 | 15.79 |
| ATOM | 1421 | CB | VAL A 194 | 17.210 | 61.135 | 81.625 | 1.00 | 16.33 |
| ATOM | 1422 | CG1 | VAL A 194 | 17.152 | 61.202 | 83.184 | 1.00 | 19.26 |
| ATOM | 1423 | CG2 | VAL A 194 | 17.079 | 59.712 | 81.106 | 1.00 | 17.70 |
| ATOM | 1424 | N | ASP A 195 | 18.050 | 61.992 | 78.728 | 1.00 | 16.54 |
| ATOM | 1425 | CA | ASP A 195 | 18.488 | 61.921 | 77.332 | 1.00 | 16.55 |
| ATOM | 1426 | C | ASP A 195 | 19.801 | 62.636 | 77.029 | 1.00 | 14.74 |
| ATOM | 1427 | O | ASP A 195 | 20.758 | 62.076 | 76.519 | 1.00 | 18.92 |
| ATOM | 1428 | CB | ASP A 195 | 17.367 | 62.455 | 76.477 | 1.00 | 15.91 |
| ATOM | 1429 | CG | ASP A 195 | 16.139 | 61.563 | 76.560 | 1.00 | 19.86 |
| ATOM | 1430 | OD1 | ASP A 195 | 16.153 | 60.385 | 76.922 | 1.00 | 27.62 |
| ATOM | 1431 | OD2 | ASP A 195 | 15.090 | 62.069 | 76.264 | 1.00 | 26.20 |
| ATOM | 1432 | N | ALA A 196 | 19.902 | 63.900 | 77.450 | 1.00 | 15.85 |
| ATOM | 1433 | CA | ALA A 196 | 21.203 | 64.555 | 77.312 | 1.00 | 14.73 |
| ATOM | 1434 | C | ALA A 196 | 22.383 | 63.806 | 77.932 | 1.00 | 18.85 |
| ATOM | 1435 | O | ALA A 196 | 23.512 | 63.751 | 77.429 | 1.00 | 21.06 |
| ATOM | 1436 | CB | ALA A 196 | 21.134 | 65.950 | 77.904 | 1.00 | 13.59 |
| ATOM | 1437 | N | ALA A 197 | 22.056 | 63.177 | 79.091 | 1.00 | 19.14 |
| ATOM | 1438 | CA | ALA A 197 | 23.098 | 62.442 | 79.808 | 1.00 | 17.62 |
| ATOM | 1439 | C | ALA A 197 | 23.644 | 61.202 | 79.090 | 1.00 | 17.71 |
| ATOM | 1440 | O | ALA A 197 | 24.851 | 60.931 | 79.104 | 1.00 | 18.18 |
| ATOM | 1441 | CB | ALA A 197 | 22.587 | 62.002 | 81.181 | 1.00 | 15.91 |
| ATOM | 1442 | N | ARG A 198 | 22.711 | 60.477 | 78.418 | 1.00 | 16.04 |
| ATOM | 1443 | CA | ARG A 198 | 23.238 | 59.409 | 77.565 | 1.00 | 15.41 |
| ATOM | 1444 | C | ARG A 198 | 24.179 | 59.843 | 76.413 | 1.00 | 14.99 |
| ATOM | 1445 | O | ARG A 198 | 25.194 | 59.219 | 76.113 | 1.00 | 17.07 |
| ATOM | 1446 | CB | ARG A 198 | 22.136 | 58.469 | 77.080 | 1.00 | 14.50 |
| ATOM | 1447 | CG | ARG A 198 | 21.195 | 58.043 | 78.179 | 1.00 | 16.67 |
| ATOM | 1448 | CD | ARG A 198 | 20.142 | 57.044 | 77.730 | 1.00 | 19.20 |
| ATOM | 1449 | NE | ARG A 198 | 19.280 | 56.629 | 78.849 | 1.00 | 22.72 |
| ATOM | 1450 | CZ | ARG A 198 | 18.003 | 57.012 | 79.061 | 1.00 | 22.30 |
| ATOM | 1451 | NH1 | ARG A 198 | 17.412 | 57.905 | 78.325 | 1.00 | 20.95 |
| ATOM | 1452 | NH2 | ARG A 198 | 17.292 | 56.518 | 80.045 | 1.00 | 21.57 |
| ATOM | 1453 | N | VAL A 199 | 23.907 | 61.030 | 75.842 | 1.00 | 17.69 |
| ATOM | 1454 | CA | VAL A 199 | 24.961 | 61.510 | 74.913 | 1.00 | 17.44 |
| ATOM | 1455 | C | VAL A 199 | 26.376 | 61.736 | 75.457 | 1.00 | 18.48 |
| ATOM | 1456 | O | VAL A 199 | 27.360 | 61.145 | 74.988 | 1.00 | 19.25 |
| ATOM | 1457 | CB | VAL A 199 | 24.452 | 62.820 | 74.284 | 1.00 | 15.93 |
| ATOM | 1458 | CG1 | VAL A 199 | 25.350 | 63.540 | 73.279 | 1.00 | 11.45 |

【図 3 7】

| | | | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----|---|-----|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1459 | CG2 | VAL | A | 199 | 23.072 | 62.640 | 73.680 | 1.00 | 15.33 |
| ATOM | 1460 | N | VAL | A | 200 | 26.471 | 62.548 | 76.550 | 1.00 | 18.52 |
| ATOM | 1461 | CA | VAL | A | 200 | 27.822 | 62.723 | 77.153 | 1.00 | 16.27 |
| ATOM | 1462 | C | VAL | A | 200 | 28.442 | 61.461 | 77.794 | 1.00 | 14.37 |
| ATOM | 1463 | O | VAL | A | 200 | 29.643 | 61.247 | 77.797 | 1.00 | 17.25 |
| ATOM | 1464 | CB | VAL | A | 200 | 27.811 | 63.938 | 78.100 | 1.00 | 16.56 |
| ATOM | 1465 | CG1 | VAL | A | 200 | 26.761 | 63.894 | 79.246 | 1.00 | 13.52 |
| ATOM | 1466 | CG2 | VAL | A | 200 | 27.666 | 65.177 | 77.226 | 1.00 | 17.14 |
| ATOM | 1467 | N | GLY | A | 201 | 27.556 | 60.570 | 78.283 | 1.00 | 14.98 |
| ATOM | 1468 | CA | GLY | A | 201 | 27.998 | 59.297 | 78.836 | 1.00 | 13.20 |
| ATOM | 1469 | C | GLY | A | 201 | 28.609 | 58.377 | 77.824 | 1.00 | 16.81 |
| ATOM | 1470 | O | GLY | A | 201 | 29.588 | 57.701 | 78.067 | 1.00 | 17.03 |
| ATOM | 1471 | N | SER | A | 202 | 28.034 | 58.413 | 76.614 | 1.00 | 17.82 |
| ATOM | 1472 | CA | SER | A | 202 | 28.757 | 57.750 | 75.509 | 1.00 | 16.70 |
| ATOM | 1473 | C | SER | A | 202 | 30.087 | 58.390 | 75.104 | 1.00 | 13.91 |
| ATOM | 1474 | O | SER | A | 202 | 31.117 | 57.765 | 74.939 | 1.00 | 18.47 |
| ATOM | 1475 | CB | SER | A | 202 | 27.813 | 57.511 | 74.303 | 1.00 | 15.94 |
| ATOM | 1476 | OG | SER | A | 202 | 27.634 | 58.737 | 73.600 | 1.00 | 19.26 |
| ATOM | 1477 | N | ALA | A | 203 | 30.094 | 59.719 | 75.030 | 1.00 | 14.76 |
| ATOM | 1478 | CA | ALA | A | 203 | 31.333 | 60.383 | 74.641 | 1.00 | 14.41 |
| ATOM | 1479 | C | ALA | A | 203 | 32.527 | 60.110 | 75.563 | 1.00 | 17.92 |
| ATOM | 1480 | O | ALA | A | 203 | 33.652 | 59.803 | 75.177 | 1.00 | 16.36 |
| ATOM | 1481 | CB | ALA | A | 203 | 31.042 | 61.872 | 74.572 | 1.00 | 13.61 |
| ATOM | 1482 | N | VAL | A | 204 | 32.200 | 60.126 | 76.880 | 1.00 | 18.27 |
| ATOM | 1483 | CA | VAL | A | 204 | 33.290 | 59.835 | 77.823 | 1.00 | 16.45 |
| ATOM | 1484 | C | VAL | A | 204 | 33.834 | 58.394 | 77.718 | 1.00 | 13.88 |
| ATOM | 1485 | O | VAL | A | 204 | 35.015 | 58.177 | 77.916 | 1.00 | 17.64 |
| ATOM | 1486 | CB | VAL | A | 204 | 32.893 | 60.245 | 79.285 | 1.00 | 16.63 |
| ATOM | 1487 | CG1 | VAL | A | 204 | 34.131 | 60.323 | 80.177 | 1.00 | 16.51 |
| ATOM | 1488 | CG2 | VAL | A | 204 | 31.836 | 59.301 | 79.862 | 1.00 | 13.53 |
| ATOM | 1489 | N | VAL | A | 205 | 32.971 | 57.392 | 77.355 | 1.00 | 15.31 |
| ATOM | 1490 | CA | VAL | A | 205 | 33.648 | 56.100 | 77.152 | 1.00 | 17.30 |
| ATOM | 1491 | C | VAL | A | 205 | 34.636 | 56.018 | 75.953 | 1.00 | 19.20 |
| ATOM | 1492 | O | VAL | A | 205 | 35.644 | 55.311 | 76.002 | 1.00 | 19.08 |
| ATOM | 1493 | CB | VAL | A | 205 | 32.563 | 55.014 | 77.035 | 1.00 | 19.10 |
| ATOM | 1494 | CG1 | VAL | A | 205 | 32.812 | 53.549 | 76.681 | 1.00 | 16.51 |
| ATOM | 1495 | CG2 | VAL | A | 205 | 31.797 | 55.088 | 78.343 | 1.00 | 17.27 |
| ATOM | 1496 | N | ALA | A | 206 | 34.409 | 56.893 | 74.934 | 1.00 | 21.03 |
| ATOM | 1497 | CA | ALA | A | 206 | 35.452 | 57.018 | 73.888 | 1.00 | 19.17 |
| ATOM | 1498 | C | ALA | A | 206 | 36.765 | 57.498 | 74.469 | 1.00 | 19.27 |
| ATOM | 1499 | O | ALA | A | 206 | 37.809 | 56.868 | 74.353 | 1.00 | 18.59 |
| ATOM | 1500 | CB | ALA | A | 206 | 34.982 | 57.988 | 72.809 | 1.00 | 16.60 |
| ATOM | 1501 | N | THR | A | 207 | 36.643 | 58.597 | 75.234 | 1.00 | 20.20 |
| ATOM | 1502 | CA | THR | A | 207 | 37.873 | 59.078 | 75.903 | 1.00 | 20.52 |
| ATOM | 1503 | C | THR | A | 207 | 38.613 | 58.126 | 76.838 | 1.00 | 21.84 |
| ATOM | 1504 | O | THR | A | 207 | 39.831 | 58.030 | 76.898 | 1.00 | 23.45 |
| ATOM | 1505 | CB | THR | A | 207 | 37.659 | 60.341 | 76.674 | 1.00 | 19.84 |
| ATOM | 1506 | OG1 | THR | A | 207 | 36.577 | 61.100 | 76.137 | 1.00 | 20.11 |
| ATOM | 1507 | CG2 | THR | A | 207 | 38.945 | 61.141 | 76.710 | 1.00 | 21.15 |
| ATOM | 1508 | N | LEU | A | 208 | 37.806 | 57.345 | 77.574 | 1.00 | 23.89 |
| ATOM | 1509 | CA | LEU | A | 208 | 38.323 | 56.332 | 78.510 | 1.00 | 22.19 |
| ATOM | 1510 | C | LEU | A | 208 | 39.165 | 55.285 | 77.783 | 1.00 | 25.28 |
| ATOM | 1511 | O | LEU | A | 208 | 40.232 | 54.880 | 78.228 | 1.00 | 24.41 |
| ATOM | 1512 | CB | LEU | A | 208 | 37.170 | 55.700 | 79.312 | 1.00 | 21.93 |

【図 3 8】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1513 | CG | LEU A 208 | 36.238 | 56.370 | 80.325 | 1.00 | 24.99 |
| ATOM | 1514 | CD1 | LEU A 208 | 35.117 | 55.631 | 81.058 | 1.00 | 26.55 |
| ATOM | 1515 | CD2 | LEU A 208 | 37.303 | 56.685 | 81.377 | 1.00 | 22.67 |
| ATOM | 1516 | N | HIS A 209 | 38.666 | 54.873 | 76.588 | 1.00 | 24.64 |
| ATOM | 1517 | CA | HIS A 209 | 39.495 | 53.970 | 75.766 | 1.00 | 20.81 |
| ATOM | 1518 | C | HIS A 209 | 40.863 | 54.530 | 75.277 | 1.00 | 19.15 |
| ATOM | 1519 | O | HIS A 209 | 41.807 | 53.872 | 74.934 | 1.00 | 20.30 |
| ATOM | 1520 | CB | HIS A 209 | 38.656 | 53.449 | 74.595 | 1.00 | 16.87 |
| ATOM | 1521 | CG | HIS A 209 | 37.588 | 52.476 | 74.994 | 1.00 | 13.42 |
| ATOM | 1522 | ND1 | HIS A 209 | 36.335 | 52.782 | 75.375 | 1.00 | 14.12 |
| ATOM | 1523 | CD2 | HIS A 209 | 37.686 | 51.099 | 74.975 | 1.00 | 12.37 |
| ATOM | 1524 | CE1 | HIS A 209 | 35.653 | 51.616 | 75.586 | 1.00 | 10.36 |
| ATOM | 1525 | NE2 | HIS A 209 | 36.493 | 50.590 | 75.334 | 1.00 | 13.53 |
| ATOM | 1526 | N | THR A 210 | 41.035 | 55.827 | 75.336 | 1.00 | 20.82 |
| ATOM | 1527 | CA | THR A 210 | 42.393 | 56.384 | 75.116 | 1.00 | 21.40 |
| ATOM | 1528 | C | THR A 210 | 43.396 | 56.387 | 76.298 | 1.00 | 26.34 |
| ATOM | 1529 | O | THR A 210 | 44.567 | 56.745 | 76.188 | 1.00 | 27.83 |
| ATOM | 1530 | CB | THR A 210 | 42.315 | 57.836 | 74.662 | 1.00 | 22.02 |
| ATOM | 1531 | OG1 | THR A 210 | 42.096 | 58.723 | 75.795 | 1.00 | 25.04 |
| ATOM | 1532 | CG2 | THR A 210 | 41.307 | 58.070 | 73.528 | 1.00 | 20.46 |
| ATOM | 1533 | N | ASN A 211 | 42.844 | 56.032 | 77.482 | 1.00 | 26.32 |
| ATOM | 1534 | CA | ASN A 211 | 43.544 | 56.135 | 78.782 | 1.00 | 23.64 |
| ATOM | 1535 | C | ASN A 211 | 44.212 | 54.824 | 79.204 | 1.00 | 20.62 |
| ATOM | 1536 | O | ASN A 211 | 43.591 | 53.785 | 79.374 | 1.00 | 22.28 |
| ATOM | 1537 | CB | ASN A 211 | 42.563 | 56.749 | 79.827 | 1.00 | 24.99 |
| ATOM | 1538 | CG | ASN A 211 | 43.226 | 56.863 | 81.206 | 1.00 | 24.09 |
| ATOM | 1539 | OD1 | ASN A 211 | 43.320 | 55.886 | 81.935 | 1.00 | 25.25 |
| ATOM | 1540 | ND2 | ASN A 211 | 43.689 | 58.038 | 81.566 | 1.00 | 21.24 |
| ATOM | 1541 | N | PRO A 212 | 45.563 | 54.884 | 79.353 | 1.00 | 22.01 |
| ATOM | 1542 | CA | PRO A 212 | 46.337 | 53.660 | 79.633 | 1.00 | 21.52 |
| ATOM | 1543 | C | PRO A 212 | 45.859 | 52.883 | 80.848 | 1.00 | 22.52 |
| ATOM | 1544 | O | PRO A 212 | 45.670 | 51.673 | 80.882 | 1.00 | 22.12 |
| ATOM | 1545 | CB | PRO A 212 | 47.743 | 54.190 | 79.845 | 1.00 | 22.52 |
| ATOM | 1546 | CG | PRO A 212 | 47.805 | 55.535 | 79.117 | 1.00 | 25.40 |
| ATOM | 1547 | CD | PRO A 212 | 46.391 | 56.076 | 79.175 | 1.00 | 22.01 |
| ATOM | 1548 | N | ALA A 213 | 45.626 | 53.674 | 81.897 | 1.00 | 23.96 |
| ATOM | 1549 | CA | ALA A 213 | 45.139 | 53.025 | 83.140 | 1.00 | 23.57 |
| ATOM | 1550 | C | ALA A 213 | 43.797 | 52.337 | 83.019 | 1.00 | 21.76 |
| ATOM | 1551 | O | ALA A 213 | 43.600 | 51.185 | 83.403 | 1.00 | 24.96 |
| ATOM | 1552 | CB | ALA A 213 | 45.039 | 54.071 | 84.259 | 1.00 | 21.55 |
| ATOM | 1553 | N | PHE A 214 | 42.885 | 53.085 | 82.373 | 1.00 | 19.30 |
| ATOM | 1554 | CA | PHE A 214 | 41.617 | 52.431 | 82.017 | 1.00 | 20.02 |
| ATOM | 1555 | C | PHE A 214 | 41.798 | 51.170 | 81.197 | 1.00 | 20.38 |
| ATOM | 1556 | O | PHE A 214 | 41.255 | 50.120 | 81.510 | 1.00 | 18.82 |
| ATOM | 1557 | CB | PHE A 214 | 40.690 | 53.445 | 81.314 | 1.00 | 23.58 |
| ATOM | 1558 | CG | PHE A 214 | 39.367 | 52.839 | 80.840 | 1.00 | 26.35 |
| ATOM | 1559 | CD1 | PHE A 214 | 38.249 | 52.765 | 81.711 | 1.00 | 24.66 |
| ATOM | 1560 | CD2 | PHE A 214 | 39.262 | 52.365 | 79.507 | 1.00 | 23.08 |
| ATOM | 1561 | CE1 | PHE A 214 | 37.032 | 52.191 | 81.265 | 1.00 | 27.05 |
| ATOM | 1562 | CE2 | PHE A 214 | 38.052 | 51.792 | 79.077 | 1.00 | 19.74 |
| ATOM | 1563 | CZ | PHE A 214 | 36.951 | 51.697 | 79.944 | 1.00 | 22.04 |
| ATOM | 1564 | N | GLN A 215 | 42.654 | 51.298 | 80.149 | 1.00 | 22.02 |
| ATOM | 1565 | CA | GLN A 215 | 42.904 | 50.137 | 79.275 | 1.00 | 21.33 |
| ATOM | 1566 | C | GLN A 215 | 43.354 | 48.889 | 79.995 | 1.00 | 21.73 |

【図 3 9】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1567 | O | GLN A 215 | 42.823 | 47.783 | 79.875 | 1.00 | 21.17 |
| ATOM | 1568 | CB | GLN A 215 | 43.970 | 50.520 | 78.278 | 1.00 | 22.37 |
| ATOM | 1569 | CG | GLN A 215 | 43.483 | 51.517 | 77.261 | 1.00 | 22.30 |
| ATOM | 1570 | CD | GLN A 215 | 44.662 | 52.026 | 76.479 | 1.00 | 28.18 |
| ATOM | 1571 | OE1 | GLN A 215 | 45.821 | 51.695 | 76.664 | 1.00 | 32.27 |
| ATOM | 1572 | NE2 | GLN A 215 | 44.359 | 52.947 | 75.605 | 1.00 | 28.35 |
| ATOM | 1573 | N | GLN A 216 | 44.375 | 49.154 | 80.845 | 1.00 | 24.60 |
| ATOM | 1574 | CA | GLN A 216 | 44.876 | 48.089 | 81.718 | 1.00 | 25.81 |
| ATOM | 1575 | C | GLN A 216 | 43.909 | 47.530 | 82.715 | 1.00 | 23.07 |
| ATOM | 1576 | O | GLN A 216 | 43.822 | 46.328 | 82.899 | 1.00 | 22.91 |
| ATOM | 1577 | CB | GLN A 216 | 46.052 | 48.544 | 82.517 | 1.00 | 33.78 |
| ATOM | 1578 | CG | GLN A 216 | 47.181 | 49.037 | 81.631 | 1.00 | 49.94 |
| ATOM | 1579 | CD | GLN A 216 | 48.161 | 49.693 | 82.574 | 1.00 | 61.57 |
| ATOM | 1580 | OE1 | GLN A 216 | 48.354 | 49.243 | 83.704 | 1.00 | 69.34 |
| ATOM | 1581 | NE2 | GLN A 216 | 48.737 | 50.805 | 82.114 | 1.00 | 63.50 |
| ATOM | 1582 | N | GLN A 217 | 43.155 | 48.439 | 83.377 | 1.00 | 22.58 |
| ATOM | 1583 | CA | GLN A 217 | 42.099 | 47.917 | 84.261 | 1.00 | 23.69 |
| ATOM | 1584 | C | GLN A 217 | 40.971 | 47.113 | 83.590 | 1.00 | 24.92 |
| ATOM | 1585 | O | GLN A 217 | 40.480 | 46.102 | 84.088 | 1.00 | 24.09 |
| ATOM | 1586 | CB | GLN A 217 | 41.565 | 49.042 | 85.189 | 1.00 | 23.44 |
| ATOM | 1587 | CG | GLN A 217 | 40.720 | 48.541 | 86.407 | 1.00 | 23.24 |
| ATOM | 1588 | CD | GLN A 217 | 41.489 | 47.589 | 87.335 | 1.00 | 21.58 |
| ATOM | 1589 | OE1 | GLN A 217 | 42.676 | 47.749 | 87.598 | 1.00 | 24.82 |
| ATOM | 1590 | NE2 | GLN A 217 | 40.827 | 46.516 | 87.744 | 1.00 | 19.85 |
| ATOM | 1591 | N | LEU A 218 | 40.628 | 47.595 | 82.390 | 1.00 | 26.00 |
| ATOM | 1592 | CA | LEU A 218 | 39.701 | 46.859 | 81.532 | 1.00 | 23.47 |
| ATOM | 1593 | C | LEU A 218 | 40.195 | 45.495 | 81.093 | 1.00 | 21.96 |
| ATOM | 1594 | O | LEU A 218 | 39.476 | 44.515 | 81.209 | 1.00 | 22.51 |
| ATOM | 1595 | CB | LEU A 218 | 39.309 | 47.724 | 80.327 | 1.00 | 23.65 |
| ATOM | 1596 | CG | LEU A 218 | 38.292 | 47.073 | 79.369 | 1.00 | 21.04 |
| ATOM | 1597 | CD1 | LEU A 218 | 38.103 | 47.980 | 78.168 | 1.00 | 25.30 |
| ATOM | 1598 | CD2 | LEU A 218 | 36.952 | 46.736 | 80.004 | 1.00 | 13.22 |
| ATOM | 1599 | N | GLN A 219 | 41.451 | 45.425 | 80.640 | 1.00 | 23.49 |
| ATOM | 1600 | CA | GLN A 219 | 42.033 | 44.079 | 80.457 | 1.00 | 29.37 |
| ATOM | 1601 | C | GLN A 219 | 41.880 | 43.156 | 81.681 | 1.00 | 29.60 |
| ATOM | 1602 | O | GLN A 219 | 41.455 | 42.016 | 81.569 | 1.00 | 29.63 |
| ATOM | 1603 | CB | GLN A 219 | 43.544 | 44.131 | 80.199 | 1.00 | 37.46 |
| ATOM | 1604 | CG | GLN A 219 | 44.052 | 44.703 | 78.867 | 1.00 | 51.74 |
| ATOM | 1605 | CD | GLN A 219 | 45.511 | 45.267 | 78.911 | 1.00 | 60.29 |
| ATOM | 1606 | OE1 | GLN A 219 | 46.415 | 44.774 | 79.568 | 1.00 | 65.45 |
| ATOM | 1607 | NE2 | GLN A 219 | 45.764 | 46.352 | 78.161 | 1.00 | 60.81 |
| ATOM | 1608 | N | LYS A 220 | 42.206 | 43.722 | 82.879 | 1.00 | 28.28 |
| ATOM | 1609 | CA | LYS A 220 | 42.004 | 42.926 | 84.111 | 1.00 | 26.68 |
| ATOM | 1610 | C | LYS A 220 | 40.588 | 42.446 | 84.386 | 1.00 | 24.54 |
| ATOM | 1611 | O | LYS A 220 | 40.347 | 41.275 | 84.640 | 1.00 | 26.87 |
| ATOM | 1612 | CB | LYS A 220 | 42.591 | 43.631 | 85.319 | 1.00 | 29.93 |
| ATOM | 1613 | CG | LYS A 220 | 44.019 | 43.952 | 84.934 | 1.00 | 36.96 |
| ATOM | 1614 | CD | LYS A 220 | 45.015 | 44.044 | 86.081 | 1.00 | 47.54 |
| ATOM | 1615 | CE | LYS A 220 | 44.741 | 45.121 | 87.121 | 1.00 | 55.28 |
| ATOM | 1616 | NZ | LYS A 220 | 44.868 | 46.456 | 86.510 | 1.00 | 61.92 |
| ATOM | 1617 | N | ALA A 221 | 39.630 | 43.379 | 84.217 | 1.00 | 21.04 |
| ATOM | 1618 | CA | ALA A 221 | 38.215 | 42.960 | 84.307 | 1.00 | 18.69 |
| ATOM | 1619 | C | ALA A 221 | 37.761 | 41.903 | 83.291 | 1.00 | 24.31 |
| ATOM | 1620 | O | ALA A 221 | 37.095 | 40.921 | 83.598 | 1.00 | 26.78 |

【図 4 0】

| | | | | | | | | |
|------|------|-----|-----------|--------|--------|--------|------|-------|
| ATOM | 1621 | CB | ALA A 221 | 37.306 | 44.177 | 84.140 | 1.00 | 14.85 |
| ATOM | 1622 | N | LYS A 222 | 38.223 | 42.106 | 82.029 | 1.00 | 24.15 |
| ATOM | 1623 | CA | LYS A 222 | 38.065 | 41.018 | 81.046 | 1.00 | 23.96 |
| ATOM | 1624 | C | LYS A 222 | 38.668 | 39.675 | 81.431 | 1.00 | 22.61 |
| ATOM | 1625 | O | LYS A 222 | 38.023 | 38.628 | 81.422 | 1.00 | 21.88 |
| ATOM | 1626 | CB | LYS A 222 | 38.591 | 41.444 | 79.659 | 1.00 | 22.92 |
| ATOM | 1627 | CG | LYS A 222 | 37.682 | 42.516 | 79.109 | 1.00 | 22.76 |
| ATOM | 1628 | CD | LYS A 222 | 38.038 | 42.903 | 77.691 | 1.00 | 22.50 |
| ATOM | 1629 | CE | LYS A 222 | 37.050 | 43.918 | 77.109 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 1630 | NZ | LYS A 222 | 37.556 | 44.613 | 75.909 | 1.00 | 21.47 |
| ATOM | 1631 | N | ALA A 223 | 39.949 | 39.728 | 81.830 | 1.00 | 22.84 |
| ATOM | 1632 | CA | ALA A 223 | 40.533 | 38.472 | 82.353 | 1.00 | 25.17 |
| ATOM | 1633 | C | ALA A 223 | 39.812 | 37.842 | 83.543 | 1.00 | 26.19 |
| ATOM | 1634 | O | ALA A 223 | 39.534 | 36.652 | 83.573 | 1.00 | 27.99 |
| ATOM | 1635 | CB | ALA A 223 | 42.013 | 38.638 | 82.691 | 1.00 | 21.36 |
| ATOM | 1636 | N | GLU A 224 | 39.424 | 38.696 | 84.487 | 1.00 | 27.72 |
| ATOM | 1637 | CA | GLU A 224 | 38.643 | 38.187 | 85.610 | 1.00 | 27.59 |
| ATOM | 1638 | C | GLU A 224 | 37.338 | 37.525 | 85.191 | 1.00 | 28.89 |
| ATOM | 1639 | O | GLU A 224 | 36.971 | 36.412 | 85.568 | 1.00 | 28.75 |
| ATOM | 1640 | CB | GLU A 224 | 38.476 | 39.348 | 86.606 | 1.00 | 29.18 |
| ATOM | 1641 | CG | GLU A 224 | 37.470 | 39.099 | 87.741 | 1.00 | 29.05 |
| ATOM | 1642 | CD | GLU A 224 | 37.335 | 40.348 | 88.557 | 1.00 | 29.41 |
| ATOM | 1643 | OE1 | GLU A 224 | 36.506 | 41.189 | 88.269 | 1.00 | 28.08 |
| ATOM | 1644 | OE2 | GLU A 224 | 38.060 | 40.487 | 89.516 | 1.00 | 31.14 |
| ATOM | 1645 | N | PHE A 225 | 36.659 | 38.233 | 84.288 | 1.00 | 29.33 |
| ATOM | 1646 | CA | PHE A 225 | 35.398 | 37.699 | 83.770 | 1.00 | 28.70 |
| ATOM | 1647 | C | PHE A 225 | 35.551 | 36.354 | 83.061 | 1.00 | 31.53 |
| ATOM | 1648 | O | PHE A 225 | 34.802 | 35.399 | 83.222 | 1.00 | 29.17 |
| ATOM | 1649 | CB | PHE A 225 | 34.786 | 38.756 | 82.858 | 1.00 | 26.48 |
| ATOM | 1650 | CG | PHE A 225 | 33.449 | 38.281 | 82.361 | 1.00 | 25.90 |
| ATOM | 1651 | CD1 | PHE A 225 | 32.361 | 38.258 | 83.250 | 1.00 | 28.71 |
| ATOM | 1652 | CD2 | PHE A 225 | 33.317 | 37.854 | 81.022 | 1.00 | 28.64 |
| ATOM | 1653 | CE1 | PHE A 225 | 31.129 | 37.758 | 82.817 | 1.00 | 29.98 |
| ATOM | 1654 | CE2 | PHE A 225 | 32.074 | 37.365 | 80.564 | 1.00 | 28.53 |
| ATOM | 1655 | CZ | PHE A 225 | 30.998 | 37.309 | 81.479 | 1.00 | 30.02 |
| ATOM | 1656 | N | ALA A 226 | 36.635 | 36.308 | 82.289 | 1.00 | 31.91 |
| ATOM | 1657 | CA | ALA A 226 | 36.996 | 35.055 | 81.643 | 1.00 | 36.17 |
| ATOM | 1658 | C | ALA A 226 | 37.178 | 33.829 | 82.536 | 1.00 | 40.94 |
| ATOM | 1659 | O | ALA A 226 | 36.704 | 32.735 | 82.271 | 1.00 | 41.75 |
| ATOM | 1660 | CB | ALA A 226 | 38.284 | 35.261 | 80.877 | 1.00 | 33.81 |
| ATOM | 1661 | N | GLN A 227 | 37.883 | 34.081 | 83.647 | 1.00 | 44.91 |
| ATOM | 1662 | CA | GLN A 227 | 38.067 | 32.931 | 84.543 | 1.00 | 49.32 |
| ATOM | 1663 | C | GLN A 227 | 36.782 | 32.579 | 85.233 | 1.00 | 51.62 |
| ATOM | 1664 | O | GLN A 227 | 36.396 | 31.467 | 85.528 | 1.00 | 50.02 |
| ATOM | 1665 | CB | GLN A 227 | 39.239 | 33.150 | 85.499 | 1.00 | 50.80 |
| ATOM | 1666 | CG | GLN A 227 | 40.441 | 33.937 | 84.900 | 1.00 | 59.92 |
| ATOM | 1667 | CD | GLN A 227 | 40.812 | 33.681 | 83.397 | 1.00 | 68.68 |
| ATOM | 1668 | OE1 | GLN A 227 | 40.799 | 32.592 | 82.834 | 1.00 | 73.97 |
| ATOM | 1669 | NE2 | GLN A 227 | 41.221 | 34.764 | 82.726 | 1.00 | 65.71 |
| ATOM | 1670 | N | HIS A 228 | 36.041 | 33.669 | 85.411 | 1.00 | 58.91 |
| ATOM | 1671 | CA | HIS A 228 | 34.687 | 33.501 | 85.925 | 1.00 | 65.53 |
| ATOM | 1672 | C | HIS A 228 | 33.816 | 32.519 | 85.143 | 1.00 | 68.04 |
| ATOM | 1673 | O | HIS A 228 | 33.014 | 31.764 | 85.662 | 1.00 | 67.46 |
| ATOM | 1674 | CB | HIS A 228 | 34.091 | 34.903 | 86.045 | 1.00 | 68.11 |

【图 4 1】

| | | | | | | | | | | |
|------|------|------|-----|---|-----|--------|--------|---------|------|--------|
| ATOM | 1675 | CG | HIS | A | 228 | 32.632 | 34.780 | 86.283 | 1.00 | 71.87 |
| ATOM | 1676 | ND1 | HIS | A | 228 | 31.729 | 34.968 | 85.313 | 1.00 | 74.51 |
| ATOM | 1677 | CD2 | HIS | A | 228 | 32.007 | 34.363 | 87.458 | 1.00 | 75.53 |
| ATOM | 1678 | CE1 | HIS | A | 228 | 30.511 | 34.660 | 85.852 | 1.00 | 78.68 |
| ATOM | 1679 | NE2 | HIS | A | 228 | 30.682 | 34.288 | 87.171 | 1.00 | 80.02 |
| ATOM | 1680 | N | GLN | A | 229 | 34.061 | 32.545 | 83.846 | 1.00 | 74.45 |
| ATOM | 1681 | CA | GLN | A | 229 | 33.306 | 31.659 | 82.963 | 1.00 | 81.06 |
| ATOM | 1682 | C | GLN | A | 229 | 33.569 | 30.149 | 83.028 | 1.00 | 85.59 |
| ATOM | 1683 | O | GLN | A | 229 | 33.123 | 29.427 | 82.135 | 1.00 | 86.52 |
| ATOM | 1684 | CB | GLN | A | 229 | 33.477 | 32.181 | 81.530 | 1.00 | 81.47 |
| ATOM | 1685 | CG | GLN | A | 229 | 33.002 | 33.631 | 81.335 | 1.00 | 81.55 |
| ATOM | 1686 | CD | GLN | A | 229 | 31.488 | 33.690 | 81.352 | 1.00 | 83.81 |
| ATOM | 1687 | OE1 | GLN | A | 229 | 30.804 | 33.832 | 82.355 | 1.00 | 82.35 |
| ATOM | 1688 | NE2 | GLN | A | 229 | 30.950 | 33.588 | 80.141 | 1.00 | 86.80 |
| ATOM | 1689 | N | LYS | A | 230 | 34.317 | 29.749 | 84.086 | 1.00 | 91.08 |
| ATOM | 1690 | CA | LYS | A | 230 | 34.965 | 28.444 | 84.325 | 1.00 | 95.45 |
| ATOM | 1691 | CB | LYS | A | 230 | 33.976 | 27.245 | 84.052 | 1.00 | 97.51 |
| ATOM | 1692 | CG | LYS | A | 230 | 34.256 | 26.053 | 83.073 | 1.00 | 98.30 |
| ATOM | 1693 | CD | LYS | A | 230 | 34.035 | 26.121 | 81.534 | 1.00 | 98.30 |
| ATOM | 1694 | CE | LYS | A | 230 | 34.810 | 27.172 | 80.713 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 1695 | NZ | LYS | A | 230 | 36.244 | 27.239 | 81.067 | 1.00 | 100.00 |
| ATOM | 1696 | C | LYS | A | 230 | 36.409 | 28.279 | 83.743 | 1.00 | 97.06 |
| ATOM | 1697 | OCT1 | LYS | A | 230 | 36.876 | 29.108 | 82.942 | 1.00 | 95.86 |
| ATOM | 1698 | OCT2 | LYS | A | 230 | 37.052 | 27.241 | 83.957 | 1.00 | 99.89 |
| ATOM | 1935 | S | SO4 | S | 231 | 22.561 | 63.872 | 89.148 | 1.00 | 45.29 |
| ATOM | 1936 | O1 | SO4 | S | 231 | 21.748 | 62.858 | 88.279 | 1.00 | 50.45 |
| ATOM | 1937 | O2 | SO4 | S | 231 | 21.648 | 64.707 | 90.036 | 1.00 | 51.74 |
| ATOM | 1938 | O3 | SO4 | S | 231 | 23.551 | 63.095 | 90.035 | 1.00 | 49.75 |
| ATOM | 1939 | O4 | SO4 | S | 231 | 23.260 | 64.912 | 88.285 | 1.00 | 44.08 |
| ATOM | 1 | O | HOH | W | 232 | 10.522 | 63.513 | 85.670 | 1.00 | 17.86 |
| ATOM | 2 | O | HOH | W | 233 | 34.116 | 63.633 | 80.578 | 1.00 | 20.45 |
| ATOM | 3 | O | HOH | W | 234 | 7.928 | 61.775 | 88.229 | 1.00 | 15.62 |
| ATOM | 4 | O | HOH | W | 235 | 10.374 | 64.545 | 82.597 | 1.00 | 14.58 |
| ATOM | 5 | O | HOH | W | 236 | 15.375 | 75.641 | 85.508 | 1.00 | 22.07 |
| ATOM | 6 | O | HOH | W | 237 | 20.773 | 44.507 | 86.785 | 1.00 | 18.67 |
| ATOM | 7 | O | HOH | W | 238 | 32.701 | 49.912 | 75.935 | 1.00 | 15.79 |
| ATOM | 8 | O | HOH | W | 239 | 21.979 | 72.096 | 84.493 | 1.00 | 19.08 |
| ATOM | 9 | O | HOH | W | 240 | 13.158 | 73.905 | 82.705 | 1.00 | 27.34 |
| ATOM | 10 | O | HOH | W | 241 | 14.358 | 71.880 | 73.410 | 1.00 | 26.83 |
| ATOM | 11 | O | HOH | W | 242 | 5.537 | 80.043 | 74.802 | 1.00 | 23.33 |
| ATOM | 12 | O | HOH | W | 243 | 36.136 | 62.604 | 78.407 | 1.00 | 23.19 |
| ATOM | 13 | O | HOH | W | 244 | 30.393 | 53.028 | 87.579 | 1.00 | 19.02 |
| ATOM | 14 | O | HOH | W | 245 | 28.532 | 49.107 | 93.252 | 1.00 | 21.32 |
| ATOM | 15 | O | HOH | W | 246 | 24.657 | 73.146 | 75.882 | 1.00 | 20.92 |
| ATOM | 16 | O | HOH | W | 247 | 10.080 | 55.567 | 81.848 | 1.00 | 33.80 |
| ATOM | 17 | O | HOH | W | 248 | 29.907 | 52.840 | 73.379 | 1.00 | 22.59 |
| ATOM | 18 | O | HOH | W | 249 | 38.583 | 48.054 | 74.575 | 1.00 | 24.10 |
| ATOM | 19 | O | HOH | W | 250 | 29.465 | 68.020 | 86.676 | 1.00 | 32.30 |
| ATOM | 20 | O | HOH | W | 251 | 12.847 | 73.680 | 85.460 | 1.00 | 40.76 |
| ATOM | 21 | O | HOH | W | 252 | 5.516 | 59.770 | 95.129 | 1.00 | 40.84 |
| ATOM | 22 | O | HOH | W | 253 | 42.504 | 47.354 | 77.319 | 1.00 | 30.77 |
| ATOM | 23 | O | HOH | W | 254 | 13.495 | 75.378 | 74.412 | 1.00 | 22.57 |
| ATOM | 24 | O | HOH | W | 255 | 17.100 | 76.564 | 77.737 | 1.00 | 30.00 |
| ATOM | 25 | O | HOH | W | 256 | 33.508 | 40.103 | 102.712 | 1.00 | 26.49 |

【図 4 2】

| | | | | | | | | |
|------|----|---|-----------|--------|--------|---------|------|-------|
| ATOM | 26 | O | HOH W 257 | 20.825 | 55.648 | 81.278 | 1.00 | 20.11 |
| ATOM | 27 | O | HOH W 258 | 19.730 | 61.701 | 89.970 | 1.00 | 23.10 |
| ATOM | 28 | O | HOH W 259 | 4.363 | 74.520 | 80.720 | 1.00 | 33.74 |
| ATOM | 29 | O | HOH W 260 | 31.490 | 42.656 | 98.480 | 1.00 | 34.19 |
| ATOM | 30 | O | HOH W 261 | 6.696 | 75.130 | 78.477 | 1.00 | 15.66 |
| ATOM | 31 | O | HOH W 262 | 10.667 | 67.023 | 75.103 | 1.00 | 38.86 |
| ATOM | 32 | O | HOH W 263 | 8.252 | 64.433 | 92.307 | 1.00 | 23.15 |
| ATOM | 33 | O | HOH W 264 | 41.924 | 51.223 | 74.247 | 1.00 | 30.19 |
| ATOM | 34 | O | HOH W 265 | 1.437 | 67.705 | 89.398 | 1.00 | 39.48 |
| ATOM | 35 | O | HOH W 266 | 4.055 | 66.946 | 91.467 | 1.00 | 29.22 |
| ATOM | 36 | O | HOH W 267 | 3.092 | 69.112 | 84.950 | 1.00 | 25.58 |
| ATOM | 37 | O | HOH W 268 | 9.537 | 59.065 | 79.795 | 1.00 | 30.90 |
| ATOM | 38 | O | HOH W 269 | 9.306 | 83.197 | 79.638 | 1.00 | 44.19 |
| ATOM | 39 | O | HOH W 270 | 34.786 | 41.166 | 75.522 | 1.00 | 32.98 |
| ATOM | 40 | O | HOH W 271 | 28.084 | 37.193 | 84.163 | 1.00 | 30.43 |
| ATOM | 41 | O | HOH W 272 | 40.742 | 49.227 | 76.024 | 1.00 | 21.82 |
| ATOM | 42 | O | HOH W 273 | 35.074 | 40.712 | 85.668 | 1.00 | 29.87 |
| ATOM | 43 | O | HOH W 274 | 30.318 | 45.526 | 96.384 | 1.00 | 35.57 |
| ATOM | 44 | O | HOH W 275 | 31.493 | 69.162 | 80.850 | 1.00 | 19.51 |
| ATOM | 45 | O | HOH W 276 | 42.914 | 61.700 | 76.016 | 1.00 | 28.69 |
| ATOM | 46 | O | HOH W 277 | 34.422 | 64.714 | 92.625 | 1.00 | 38.81 |
| ATOM | 47 | O | HOH W 278 | 13.405 | 78.374 | 80.916 | 1.00 | 25.22 |
| ATOM | 48 | O | HOH W 279 | 44.634 | 57.811 | 84.433 | 1.00 | 31.73 |
| ATOM | 49 | O | HOH W 280 | 44.303 | 60.992 | 82.740 | 1.00 | 28.14 |
| ATOM | 50 | O | HOH W 281 | 32.596 | 51.432 | 73.247 | 1.00 | 22.63 |
| ATOM | 51 | O | HOH W 282 | 22.182 | 40.126 | 75.125 | 1.00 | 27.50 |
| ATOM | 52 | O | HOH W 283 | 18.482 | 55.362 | 89.100 | 1.00 | 21.25 |
| ATOM | 53 | O | HOH W 284 | 36.960 | 42.360 | 74.192 | 1.00 | 28.88 |
| ATOM | 54 | O | HOH W 285 | 35.881 | 48.845 | 94.047 | 1.00 | 26.90 |
| ATOM | 55 | O | HOH W 286 | 26.212 | 59.698 | 94.760 | 1.00 | 23.37 |
| ATOM | 56 | O | HOH W 287 | 29.246 | 44.303 | 73.369 | 1.00 | 40.38 |
| ATOM | 57 | O | HOH W 288 | 27.356 | 35.947 | 80.422 | 1.00 | 31.74 |
| ATOM | 58 | O | HOH W 289 | 40.482 | 45.029 | 76.766 | 1.00 | 30.88 |
| ATOM | 59 | O | HOH W 290 | 24.864 | 58.724 | 91.112 | 1.00 | 25.30 |
| ATOM | 60 | O | HOH W 291 | 28.560 | 61.547 | 91.755 | 1.00 | 39.37 |
| ATOM | 61 | O | HOH W 292 | 27.888 | 63.113 | 90.252 | 1.00 | 40.28 |
| ATOM | 62 | O | HOH W 293 | 31.069 | 41.023 | 103.435 | 1.00 | 38.13 |
| ATOM | 63 | O | HOH W 294 | 5.144 | 47.860 | 86.978 | 1.00 | 37.63 |
| ATOM | 64 | O | HOH W 295 | 29.373 | 52.425 | 90.409 | 1.00 | 21.69 |
| ATOM | 65 | O | HOH W 296 | 41.571 | 51.401 | 87.864 | 1.00 | 31.72 |
| ATOM | 66 | O | HOH W 297 | 35.633 | 56.807 | 101.396 | 1.00 | 42.27 |
| ATOM | 67 | O | HOH W 298 | 35.257 | 40.157 | 78.063 | 1.00 | 30.17 |
| ATOM | 68 | O | HOH W 299 | 33.734 | 71.189 | 79.910 | 1.00 | 32.64 |
| ATOM | 69 | O | HOH W 300 | 17.659 | 69.593 | 75.158 | 1.00 | 46.73 |
| ATOM | 70 | O | HOH W 301 | 17.005 | 72.932 | 72.774 | 1.00 | 33.93 |
| ATOM | 71 | O | HOH W 302 | 15.769 | 48.059 | 85.107 | 1.00 | 24.21 |
| ATOM | 72 | O | HOH W 303 | 15.023 | 64.697 | 75.333 | 1.00 | 39.99 |
| ATOM | 73 | O | HOH W 304 | 13.546 | 67.305 | 74.469 | 1.00 | 38.11 |
| ATOM | 74 | O | HOH W 305 | 30.044 | 75.863 | 82.738 | 1.00 | 29.02 |
| ATOM | 75 | O | HOH W 306 | 5.253 | 66.383 | 98.323 | 1.00 | 61.09 |
| ATOM | 76 | O | HOH W 307 | 25.914 | 72.829 | 89.073 | 1.00 | 48.08 |
| ATOM | 77 | O | HOH W 308 | 38.474 | 67.620 | 76.050 | 1.00 | 32.88 |
| ATOM | 78 | O | HOH W 309 | 34.101 | 41.534 | 100.215 | 1.00 | 39.54 |
| ATOM | 79 | O | HOH W 310 | 29.974 | 37.419 | 76.650 | 1.00 | 39.99 |

【図 4 3】

| | | | | | | | | |
|------|-----|---|-----------|--------|--------|---------|------|-------|
| ATOM | 80 | O | HOH W 311 | 17.829 | 44.406 | 81.773 | 1.00 | 29.29 |
| ATOM | 81 | O | HOH W 312 | 17.766 | 66.478 | 75.705 | 1.00 | 34.51 |
| ATOM | 82 | O | HOH W 313 | 35.983 | 70.225 | 78.152 | 1.00 | 38.85 |
| ATOM | 83 | O | HOH W 314 | 18.063 | 58.644 | 75.592 | 1.00 | 33.24 |
| ATOM | 84 | O | HOH W 315 | 17.740 | 45.824 | 75.692 | 1.00 | 31.29 |
| ATOM | 85 | O | HOH W 316 | 21.442 | 55.668 | 101.498 | 1.00 | 30.06 |
| ATOM | 86 | O | HOH W 317 | 30.660 | 37.639 | 105.501 | 1.00 | 46.34 |
| ATOM | 87 | O | HOH W 318 | 28.143 | 47.582 | 99.410 | 1.00 | 71.00 |
| ATOM | 88 | O | HOH W 319 | 11.398 | 65.394 | 76.821 | 1.00 | 34.86 |
| ATOM | 89 | O | HOH W 320 | 31.737 | 45.760 | 98.744 | 1.00 | 38.11 |
| ATOM | 90 | O | HOH W 321 | 16.084 | 45.559 | 87.137 | 1.00 | 43.68 |
| ATOM | 91 | O | HOH W 322 | 36.498 | 37.962 | 78.989 | 1.00 | 35.45 |
| ATOM | 92 | O | HOH W 323 | 41.868 | 42.172 | 76.980 | 1.00 | 56.04 |
| ATOM | 93 | O | HOH W 324 | 44.704 | 68.004 | 76.606 | 1.00 | 73.28 |
| ATOM | 94 | O | HOH W 325 | 30.214 | 44.935 | 101.119 | 1.00 | 28.63 |
| ATOM | 95 | O | HOH W 326 | 43.719 | 69.244 | 83.004 | 1.00 | 32.20 |
| ATOM | 96 | O | HOH W 327 | 7.992 | 54.768 | 93.490 | 1.00 | 36.05 |
| ATOM | 97 | O | HOH W 328 | 11.059 | 49.604 | 75.476 | 1.00 | 43.80 |
| ATOM | 98 | O | HOH W 329 | 17.730 | 37.202 | 79.516 | 1.00 | 44.41 |
| ATOM | 99 | O | HOH W 330 | 14.170 | 59.796 | 74.913 | 1.00 | 70.26 |
| ATOM | 100 | O | HOH W 331 | 28.648 | 70.326 | 88.645 | 1.00 | 34.35 |
| ATOM | 101 | O | HOH W 332 | 16.146 | 57.197 | 73.492 | 1.00 | 49.27 |
| ATOM | 102 | O | HOH W 333 | 11.086 | 52.502 | 82.116 | 1.00 | 39.47 |
| ATOM | 103 | O | HOH W 334 | 15.950 | 60.744 | 73.392 | 1.00 | 63.16 |
| ATOM | 104 | O | HOH W 335 | 23.809 | 74.443 | 89.142 | 1.00 | 63.73 |
| ATOM | 105 | O | HOH W 336 | 43.077 | 70.945 | 86.543 | 1.00 | 41.77 |
| ATOM | 106 | O | HOH W 337 | 44.625 | 68.578 | 85.466 | 1.00 | 42.53 |
| ATOM | 107 | O | HOH W 338 | 38.003 | 70.941 | 79.707 | 1.00 | 47.97 |
| ATOM | 108 | O | HOH W 339 | 42.635 | 39.826 | 86.317 | 1.00 | 39.90 |
| ATOM | 109 | O | HOH W 340 | 28.158 | 51.028 | 97.893 | 1.00 | 35.28 |
| ATOM | 110 | O | HOH W 341 | 34.562 | 57.666 | 98.193 | 1.00 | 56.42 |
| ATOM | 111 | O | HOH W 342 | 23.659 | 34.535 | 79.197 | 1.00 | 84.39 |
| ATOM | 112 | O | HOH W 343 | 10.337 | 58.458 | 76.704 | 1.00 | 45.85 |
| ATOM | 113 | O | HOH W 344 | 32.164 | 75.101 | 85.461 | 1.00 | 54.21 |
| ATOM | 114 | O | HOH W 345 | 32.930 | 38.410 | 86.586 | 1.00 | 43.15 |
| ATOM | 115 | O | HOH W 346 | 32.310 | 36.987 | 102.558 | 1.00 | 47.71 |
| ATOM | 116 | O | HOH W 347 | 11.163 | 49.101 | 82.634 | 1.00 | 84.37 |
| ATOM | 117 | O | HOH W 348 | 34.268 | 69.634 | 83.019 | 1.00 | 47.39 |
| ATOM | 118 | O | HOH W 349 | 31.352 | 37.085 | 89.579 | 1.00 | 74.88 |
| ATOM | 119 | O | HOH W 350 | 29.118 | 56.986 | 95.860 | 1.00 | 34.59 |
| ATOM | 120 | O | HOH W 351 | 1.634 | 70.786 | 81.659 | 1.00 | 41.89 |
| ATOM | 121 | O | HOH W 352 | 2.044 | 71.714 | 85.736 | 1.00 | 37.84 |
| ATOM | 122 | O | HOH W 353 | 16.219 | 75.511 | 74.471 | 1.00 | 44.53 |
| ATOM | 123 | O | HOH W 354 | 24.035 | 45.705 | 97.204 | 1.00 | 48.11 |
| ATOM | 124 | O | HOH W 355 | 17.939 | 77.382 | 82.853 | 1.00 | 65.65 |
| ATOM | 125 | O | HOH W 356 | 12.504 | 76.991 | 70.634 | 1.00 | 50.43 |
| ATOM | 126 | O | HOH W 357 | 16.951 | 78.295 | 74.889 | 1.00 | 47.02 |
| ATOM | 127 | O | HOH W 358 | 15.777 | 75.404 | 81.566 | 1.00 | 33.68 |
| ATOM | 128 | O | HOH W 359 | 37.401 | 72.376 | 82.831 | 1.00 | 50.52 |
| ATOM | 129 | O | HOH W 360 | 14.060 | 44.359 | 88.918 | 1.00 | 80.84 |
| ATOM | 130 | O | HOH W 361 | 32.619 | 76.123 | 75.757 | 1.00 | 42.84 |
| ATOM | 131 | O | HOH W 362 | 21.836 | 66.226 | 94.339 | 1.00 | 63.40 |
| ATOM | 132 | O | HOH W 363 | 16.011 | 46.526 | 82.837 | 1.00 | 38.42 |
| ATOM | 133 | O | HOH W 364 | 7.716 | 57.886 | 82.470 | 1.00 | 50.22 |

【図 4 4】

| | | | | | | | | |
|------|-----|---|-----------|--------|--------|---------|------|-------|
| ATOM | 134 | O | HOH W 365 | 41.813 | 72.155 | 81.960 | 1.00 | 76.60 |
| ATOM | 135 | O | HOH W 366 | 5.810 | 63.614 | 94.440 | 1.00 | 41.72 |
| ATOM | 136 | O | HOH W 367 | 22.833 | 66.006 | 98.308 | 1.00 | 65.79 |
| ATOM | 137 | O | HOH W 368 | 21.384 | 36.791 | 76.692 | 1.00 | 59.29 |
| ATOM | 138 | O | HOH W 369 | 38.765 | 52.950 | 92.219 | 1.00 | 27.87 |
| ATOM | 139 | O | HOH W 370 | 46.430 | 68.991 | 81.609 | 1.00 | 70.52 |
| ATOM | 140 | O | HOH W 371 | 36.973 | 69.709 | 83.153 | 1.00 | 33.81 |
| ATOM | 141 | O | HOH W 372 | 22.238 | 43.716 | 92.825 | 1.00 | 44.49 |
| ATOM | 142 | O | HOH W 373 | 23.096 | 80.189 | 77.308 | 1.00 | 50.73 |
| ATOM | 143 | O | HOH W 374 | 2.790 | 53.932 | 81.478 | 1.00 | 50.22 |
| ATOM | 144 | O | HOH W 375 | 3.292 | 64.768 | 94.055 | 1.00 | 46.64 |
| ATOM | 145 | O | HOH W 376 | 26.937 | 79.257 | 75.755 | 1.00 | 47.21 |
| ATOM | 146 | O | HOH W 377 | 45.046 | 50.594 | 85.873 | 1.00 | 46.10 |
| ATOM | 147 | O | HOH W 378 | 24.988 | 68.312 | 90.158 | 1.00 | 39.03 |
| ATOM | 148 | O | HOH W 379 | 2.045 | 61.203 | 93.643 | 1.00 | 49.73 |
| ATOM | 149 | O | HOH W 380 | 44.273 | 56.110 | 87.700 | 1.00 | 46.74 |
| ATOM | 150 | O | HOH W 381 | 26.747 | 76.462 | 73.043 | 1.00 | 50.91 |
| ATOM | 151 | O | HOH W 382 | 40.545 | 70.889 | 76.918 | 1.00 | 68.80 |
| ATOM | 152 | O | HOH W 383 | 25.523 | 80.486 | 83.807 | 1.00 | 67.90 |
| ATOM | 153 | O | HOH W 384 | 40.972 | 36.296 | 87.372 | 1.00 | 66.49 |
| ATOM | 154 | O | HOH W 385 | 12.617 | 56.710 | 77.567 | 1.00 | 44.81 |
| ATOM | 155 | O | HOH W 386 | 44.460 | 48.054 | 74.082 | 1.00 | 41.02 |
| ATOM | 156 | O | HOH W 387 | 35.781 | 73.896 | 86.117 | 1.00 | 38.14 |
| ATOM | 157 | O | HOH W 388 | 21.625 | 80.398 | 81.815 | 1.00 | 47.96 |
| ATOM | 158 | O | HOH W 389 | 46.628 | 56.635 | 82.977 | 1.00 | 50.89 |
| ATOM | 159 | O | HOH W 390 | 12.308 | 51.573 | 78.083 | 1.00 | 64.92 |
| ATOM | 160 | O | HOH W 391 | 30.773 | 39.420 | 87.798 | 1.00 | 55.92 |
| ATOM | 161 | O | HOH W 392 | 26.088 | 65.110 | 89.923 | 1.00 | 44.80 |
| ATOM | 162 | O | HOH W 393 | 10.719 | 70.886 | 96.928 | 1.00 | 48.46 |
| ATOM | 163 | O | HOH W 394 | 12.474 | 47.243 | 84.457 | 1.00 | 53.08 |
| ATOM | 164 | O | HOH W 395 | 24.296 | 71.312 | 91.828 | 1.00 | 48.39 |
| ATOM | 165 | O | HOH W 396 | 6.459 | 50.108 | 83.133 | 1.00 | 57.82 |
| ATOM | 166 | O | HOH W 397 | 42.423 | 66.213 | 75.196 | 1.00 | 34.97 |
| ATOM | 167 | O | HOH W 398 | 29.045 | 53.518 | 101.769 | 1.00 | 46.59 |
| ATOM | 168 | O | HOH W 399 | 27.195 | 39.655 | 105.406 | 1.00 | 41.59 |
| ATOM | 169 | O | HOH W 400 | 6.834 | 56.385 | 96.211 | 1.00 | 45.81 |
| ATOM | 170 | O | HOH W 401 | 47.957 | 50.138 | 78.280 | 1.00 | 43.60 |
| ATOM | 171 | O | HOH W 402 | 23.330 | 36.461 | 72.787 | 1.00 | 54.41 |
| ATOM | 172 | O | HOH W 403 | 29.051 | 79.533 | 81.900 | 1.00 | 78.87 |
| ATOM | 173 | O | HOH W 404 | 46.670 | 55.026 | 74.340 | 1.00 | 68.61 |
| ATOM | 174 | O | HOH W 405 | 28.985 | 78.746 | 85.840 | 1.00 | 75.16 |
| ATOM | 175 | O | HOH W 406 | 32.117 | 68.589 | 73.365 | 1.00 | 42.10 |
| ATOM | 176 | O | HOH W 407 | 48.677 | 52.842 | 75.727 | 1.00 | 66.77 |
| ATOM | 177 | O | HOH W 408 | 29.185 | 36.245 | 72.017 | 1.00 | 75.24 |
| ATOM | 178 | O | HOH W 409 | 37.168 | 67.596 | 97.670 | 1.00 | 38.24 |
| ATOM | 179 | O | HOH W 410 | 11.986 | 77.352 | 92.370 | 1.00 | 35.94 |
| ATOM | 180 | O | HOH W 411 | 39.548 | 63.174 | 98.280 | 1.00 | 39.58 |
| ATOM | 181 | O | HOH W 412 | 30.500 | 79.967 | 79.292 | 1.00 | 62.87 |
| ATOM | 182 | O | HOH W 413 | 18.003 | 41.205 | 83.764 | 1.00 | 64.48 |
| ATOM | 183 | O | HOH W 414 | 34.455 | 37.242 | 89.080 | 1.00 | 52.58 |
| ATOM | 184 | O | HOH W 415 | 47.074 | 60.938 | 83.746 | 1.00 | 66.98 |
| ATOM | 185 | O | HOH W 416 | 10.880 | 54.535 | 78.559 | 1.00 | 45.29 |
| ATOM | 186 | O | HOH W 417 | 30.230 | 76.830 | 74.341 | 1.00 | 71.09 |
| ATOM | 187 | O | HOH W 418 | 12.118 | 81.147 | 79.341 | 1.00 | 49.66 |

【図 4 5】

| | | | | | | | | |
|------|-----|---|-----------|--------|--------|---------|------|-------|
| ATOM | 188 | O | HOH W 419 | 32.095 | 76.945 | 80.548 | 1.00 | 63.23 |
| ATOM | 189 | O | HOH W 420 | -0.301 | 68.264 | 84.539 | 1.00 | 48.83 |
| ATOM | 190 | O | HOH W 421 | 10.822 | 64.227 | 102.313 | 1.00 | 81.32 |
| ATOM | 191 | O | HOH W 422 | 23.374 | 42.555 | 101.170 | 1.00 | 42.91 |
| ATOM | 192 | O | HOH W 423 | 20.016 | 59.713 | 74.793 | 1.00 | 38.45 |
| ATOM | 193 | O | HOH W 424 | 15.833 | 78.412 | 79.495 | 1.00 | 56.01 |
| ATOM | 194 | O | HOH W 425 | 43.534 | 35.850 | 84.957 | 1.00 | 63.16 |
| ATOM | 195 | O | HOH W 426 | 11.933 | 68.018 | 98.874 | 1.00 | 52.15 |
| ATOM | 196 | O | HOH W 427 | 20.777 | 37.368 | 85.962 | 1.00 | 57.71 |
| ATOM | 197 | O | HOH W 428 | 22.392 | 36.632 | 89.560 | 1.00 | 68.43 |
| ATOM | 198 | O | HOH W 429 | 29.340 | 37.487 | 101.980 | 1.00 | 74.20 |
| ATOM | 199 | O | HOH W 430 | 23.237 | 39.294 | 91.878 | 1.00 | 74.07 |
| ATOM | 200 | O | HOH W 431 | 13.654 | 75.325 | 94.697 | 1.00 | 73.83 |
| ATOM | 201 | O | HOH W 432 | 27.904 | 38.307 | 96.631 | 1.00 | 57.14 |
| ATOM | 202 | O | HOH W 433 | 44.213 | 59.909 | 79.188 | 1.00 | 37.71 |
| ATOM | 203 | O | HOH W 434 | 2.129 | 75.408 | 79.755 | 1.00 | 64.17 |
| ATOM | 204 | O | HOH W 435 | 13.993 | 43.469 | 84.483 | 1.00 | 59.78 |
| ATOM | 205 | O | HOH W 436 | 31.644 | 55.529 | 99.951 | 1.00 | 58.81 |
| ATOM | 206 | O | HOH W 437 | 9.462 | 82.415 | 76.470 | 1.00 | 48.44 |
| ATOM | 207 | O | HOH W 438 | 21.813 | 58.761 | 98.061 | 1.00 | 60.37 |
| ATOM | 208 | O | HOH W 439 | 22.202 | 59.533 | 93.382 | 1.00 | 43.39 |
| ATOM | 209 | O | HOH W 440 | 18.118 | 43.497 | 86.455 | 1.00 | 46.86 |
| ATOM | 210 | O | HOH W 441 | 13.762 | 54.340 | 105.466 | 1.00 | 57.78 |
| ATOM | 211 | O | HOH W 442 | 33.277 | 73.931 | 83.853 | 1.00 | 56.73 |
| ATOM | 212 | O | HOH W 443 | 34.442 | 68.648 | 90.744 | 1.00 | 27.90 |
| ATOM | 213 | O | HOH W 444 | 30.640 | 67.899 | 91.831 | 1.00 | 53.48 |
| ATOM | 214 | O | HOH W 445 | 40.813 | 44.217 | 74.058 | 1.00 | 53.35 |
| ATOM | 215 | O | HOH W 446 | 33.012 | 71.334 | 90.213 | 1.00 | 53.98 |
| ATOM | 216 | O | HOH W 447 | 25.130 | 57.928 | 101.293 | 1.00 | 38.97 |
| ATOM | 217 | O | HOH W 448 | 7.584 | 82.067 | 74.163 | 1.00 | 26.55 |
| ATOM | 218 | O | HOH W 449 | 42.214 | 40.521 | 78.980 | 1.00 | 37.75 |
| ATOM | 219 | O | HOH W 450 | 8.915 | 57.776 | 101.115 | 1.00 | 50.37 |
| ATOM | 220 | O | HOH W 451 | 15.963 | 42.582 | 79.699 | 1.00 | 71.24 |
| ATOM | 221 | O | HOH W 452 | 23.011 | 77.967 | 75.363 | 1.00 | 64.04 |
| ATOM | 222 | O | HOH W 453 | 36.910 | 35.452 | 88.469 | 1.00 | 70.47 |
| ATOM | 223 | O | HOH W 454 | 37.814 | 55.271 | 99.966 | 1.00 | 54.36 |
| ATOM | 224 | O | HOH W 455 | 26.721 | 58.439 | 99.230 | 1.00 | 86.46 |
| ATOM | 225 | O | HOH W 456 | 16.108 | 40.093 | 81.126 | 1.00 | 98.28 |
| ATOM | 226 | O | HOH W 457 | 27.800 | 35.543 | 96.536 | 1.00 | 63.56 |
| ATOM | 227 | O | HOH W 458 | 5.859 | 51.318 | 95.801 | 1.00 | 68.96 |
| ATOM | 228 | O | HOH W 459 | 7.841 | 51.875 | 96.622 | 1.00 | 64.76 |
| ATOM | 229 | O | HOH W 460 | 28.280 | 66.535 | 89.122 | 1.00 | 73.27 |
| ATOM | 230 | O | HOH W 461 | 13.943 | 46.268 | 81.680 | 1.00 | 56.20 |
| ATOM | 231 | O | HOH W 462 | 14.681 | 69.220 | 73.344 | 1.00 | 83.46 |
| ATOM | 232 | O | HOH W 463 | 30.388 | 71.379 | 89.815 | 1.00 | 60.45 |
| ATOM | 233 | O | HOH W 464 | 8.062 | 56.915 | 75.809 | 1.00 | 59.76 |
| ATOM | 234 | O | HOH W 465 | 30.104 | 41.907 | 101.688 | 1.00 | 61.89 |
| ATOM | 235 | O | HOH W 466 | 4.988 | 49.407 | 95.471 | 1.00 | 61.48 |
| ATOM | 236 | O | HOH W 467 | 8.747 | 53.997 | 77.187 | 1.00 | 79.74 |
| END | | | | | | | | |

【書類名】 要約書

【要約書】

【課題】 ヌクレオシド-5' -リン酸生産能が向上した新規な変異型ヌクレオシド-5' -リン酸生産酵素、その取得のための新規な手段、及び該酵素の用途を提供する。

【解決手段】 ヌクレオシド-5' -リン酸生産酵素において、Lys残基1つ、Arg残基2つ、His残基2つが存在し、これらのC α 間距離が図1に示す範囲内にあり、かつその付近にヌクレオシドが結合するスペースを有する、リン酸基転移活性及び／又はホスファターゼ活性を有する酵素のヌクレオシド-5' -リン酸生産能が向上した変異型ヌクレオシド-5' -リン酸生産酵素。既知の酵素の結晶のX線構造解析に基づく変異の確定による該酵素の製造方法。

【効果】 より活性の高い酵素の取得が容易となった。

【選択図】 なし

認定・付加情報

| | |
|---------|--------------------|
| 特許出願の番号 | 平成11年 特許願 第249545号 |
| 受付番号 | 59900856637 |
| 書類名 | 特許願 |
| 担当官 | 第五担当上席 0094 |
| 作成日 | 平成11年 9月 7日 |

<認定情報・付加情報>

【提出日】 平成11年 9月 3日

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号

[000000066]

| | |
|----------|------------------|
| 1. 変更年月日 | 1991年 7月 2日 |
| [変更理由] | 住所変更 |
| 住 所 | 東京都中央区京橋1丁目15番1号 |
| 氏 名 | 味の素株式会社 |